

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ УКРАИНЫ

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
«ХАРЬКОВСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ»

А. Г. Багмут, А. А. Дроздова

ОСНОВЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

**Учебно-методическое пособие
по курсу «Физика. Специальные разделы»
для студентов технических специальностей
всех форм обучения**

Утверждено
редакционно-издательским
советом университета,
протокол № 1 от 03.02.16

Харьков
НТУ «ХПИ»
2018

УДК 538.95(075)

Б14

Рецензенты:

С. И. Шевченко, д-р физ.-мат. наук, профессор,
Лауреат государственной премии Украины,
ведущий научный сотрудник ФТИНТ НАНУ;

Н. Б. Фатьянова, кандидат физ.-мат. наук,
доцент НТУ «ХПИ»

Навчально-методичний посібник містить стисло викладений теоретичний матеріал, приклади розв'язання задач з розділу «Фізика твердого тіла» курсу «Спец. розділи Фізики» та перелік контрольних запитань для самоперевірки.

Посібник призначено для студентів технічних напрямків освіти.

Багмут А. Г.

Б14 Основы физики твердого тела: учеб.-метод. пособ. / А. Г. Багмут, А. А. Дроздова. – Харьков: НТУ «ХПИ», 2018. – 100 с. – На рус. яз.

ISBN 978-617-05-0261-2

Учебно-методическое пособие содержит кратко изложенный теоретический материал, примеры решения задач к разделу «Физика твердого тела» курса «Физика. Специальные разделы» и перечень контрольных вопросов для самопроверки.

Пособие предназначено для студентов технических направлений образования.

Ил. 18. Табл. 1. Библиогр. 19 наим.

УДК 538.95(075)

ISBN 978-617-05-0261-2

© Багмут А. Г., Дроздова А. А., 2018.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
1. КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ ТЕЛ	5
1.1. Теоретические сведения	5
1.2. Примеры решения задач	11
2. ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ	20
2.1. Теоретические сведения	20
2.2. Примеры решения задач	25
3. ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ	38
3.1. Теоретические сведения	38
3.1.1. Теплоемкость	41
3.1.2. Теплопроводность	44
3.2. Примеры решения задач	46
4. ЗОННАЯ ТЕОРИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА	59
4.1. Теоретические сведения	59
4.2. Примеры решения задач	64
5. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ	75
5.1. Проводимость металлов. Теоретические сведения	75
5.2. Примеры решения задач	79
5.3. Проводимость полупроводников. Теоретические сведения	87
5.4. Примеры решения задач	91

ВВЕДЕНИЕ

Физика твердого тела изучает структуру и свойства твердых тел.

Развитие новых технологий требует повышения качества подготовки специалистов в области физики твердого тела. Изучение физических процессов и явлений в твердом теле крайне необходимо при создании новых видов материалов, при разработке и эксплуатации приборов и систем микро- и нанoeлектроники.

Предлагаемое учебно-методическое пособие окажет необходимую помощь в изучении курса физики твердого тела или специальных глав физики и в приобретении навыков решения задач по данному курсу студентами второго и старших курсов.

Пособие предназначено для студентов технических специальностей высших учебных заведений.

В первой главе рассмотрены некоторые основы кристаллографии твердого тела.

Во второй главе представлены электронные свойства твердых тел, описываются вопросы классической статистики (распределение Максвелла – Больцмана) и квантовых статистик фермионов (распределение Ферми – Дирака) и бозонов (распределение Бозе – Эйнштейна).

В третьей главе рассмотрены тепловые свойства твердых тел: теплоемкость (классическая и квантовая теория), теплопроводность.

В четвертой главе представлена зонная теория твердых тел, позволяющая с единой точки зрения истолковать существование металлов, полупроводников и диэлектриков.

В пятой главе обсуждаются электрические свойства твердых тел: металлов и полупроводников.

В каждой из глав кратко изложен основной материал, основные формулы, необходимые для самостоятельного решения задач, показаны примеры решения задач с подробным объяснением. В конце каждой темы приведен список рекомендованной литературы и предложен список вопросов для самопроверки.

Авторы выражают признательность рецензентам: докт. физ.-мат. наук, профессору, Лауреату государственной премии Украины, ведущему научному сотруднику ФТИНТ НАНУ С.И. Шевченко и кандидату физ.-мат. наук, доценту кафедры физики НТУ «ХПИ» Н.Б. Фатьяновой за внимательное рецензирование и ряд полезных замечаний.

1. КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

1.1. Теоретические сведения

Совершенство кристаллической структуры и фундаментальные свойства твердого тела объясняются той периодичностью, с которой размещены в пространстве его структурные элементы.

Кристаллическая решетка – это упорядоченное расположение частиц (атомов, молекул, ионов) в строго определенных точках пространства. Точки, в которых размещены частицы, называются *узлами кристаллической решетки*. В зависимости от типа частиц, расположенных в узлах кристаллической решетки, и характера связи между ними, различают четыре типа кристаллических решеток: ионные, атомные, молекулярные, металлические.

Реальную кристаллическую структуру можно описать с помощью решетки Бравэ, являющейся математической моделью, отражающей трансляционную симметрию кристалла. Всевозможные виды симметрии, которые могут наблюдаться в кристаллической решетке, порождают 32 так называемые *точечные группы симметрии*, которые в свою очередь образуют 17 типов решеток, называемых *кристаллографическими системами*. Точечным группам соответствуют 14 видов различных пространственных конструкций, решеток Бравэ (табл.1.1). Эти решетки отличаются друг от друга видом элементарных ячеек (рис.1.1).

Каждая решетка Бравэ характеризуется шестью параметрами: длинами векторов трансляции (a , b , c) и углами (α , β , γ), которые они образуют друг с другом (рис.1.1).

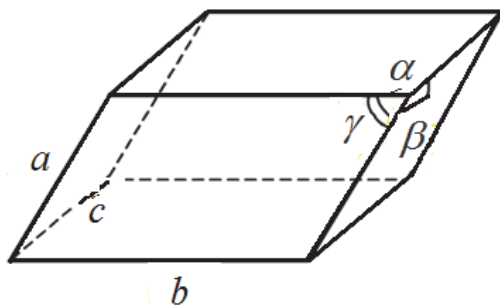


Рис. 1.1. Параметры элементарной ячейки

Таблица 1.1 – Классификация кристаллических решеток

Сингония	Тип центрировки ячейки Бравэ				
	Примитивная	Базоцентрированная	Объемноцентрированная	Гранецентрированная	Дважды объемноцентрированная
Кубическая (куб)					
Триклинная (параллелепипед)	$a \neq b, \gamma \neq 90^\circ$ 				
Моноклинная (призма с параллелограммом в основании)	$\beta \neq 90^\circ$ $a, \gamma = 90^\circ$ 	$\beta \neq 90^\circ$ $a, \gamma = 90^\circ$ 			
Ромбическая (прямоугольный параллелепипед)	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	
Тетрагональная (прямоугольный параллелепипед с квадратом в основании)	$a \neq c$ 		$a \neq c$ 		
Гексагональная (призма с основанием правильного центрированного шестиугольника)	$\gamma = 120^\circ$ 				

Решетки Бравэ делятся на 4 типа 1) примитивный – узлы расположены только в вершинах параллелепипеда, 2) базоцентрированный – имеется ещё по одному узлу в центрах двух противоположащих граней, 3) объёмноцентрированный – к примитивному типу добавлен узел в центре ячейки, 4) гранецентрированный – имеется по одному узлу в центре каждой грани. *По сингониям (системам) решетки Бравэ распределяются следующим образом:* триклинная – 1, моноклинных – 2, тетрагональных – 2, ромбических – 4, тригональная (ромбоэдрическая) – 1, гексагональная – 1, кубических – 3 (табл. 1.1).

Периодом кристаллической решетки является длина ребра элементарной ячейки. Для самой простой идеальной одноатомной кубической решетки это просто расстояние между соседними атомами. В общем случае – это наименьшее расстояние, при сдвиге на которое решетка точно воспроизводит свой исходный вид, то есть в каждом ее узле оказываются такие же атомы, что и до сдвига.

Для обозначения узлов, направлений и плоскостей в кристаллической решетке вводятся индексы узлов, направлений и плоскостей.

Индексы узлов записывают в двойных квадратных скобках $[[hkl]]$. Индексы направлений записываются в одинарных квадратных скобках $[hkl]$. По определению, *индексы направления* представляют собой три наименьших числа, характеризующих положение ближайшего узла, лежащего на данном направлении. *Индексы плоскости*, называемые *индексами Миллера*, записывают в круглых скобках $(h\ k\ l)$ (рис. 1.2). Индексы Миллера связаны с минимальными отрезками, отсекаемыми плоскостью на осях координат.

Любую кристаллическую решетку можно представить семейством узловых плоскостей, ориентация которых задается нормальным вектором H (вектором обратной решетки):

$$H = ha^* + kb^* + lc^*, \quad (1.1)$$

где h, k, l – индексы плоскости, которые являются целыми числами; a^*, b^*, c^* – базисные векторы обратной решетки.

При известных индексах плоскости для нахождения отрезков следует взять обратные величины индексов $\left(\frac{1}{h}, \frac{1}{k}, \frac{1}{l}\right)$ и привести их к наименьшему целому, кратному каждому из полученных чисел. Полученные значения и есть наименьшие отрезки, отсекаемые плоскостью (hkl)

на осях координат. Если известны отрезки, отсекаемые на осях координат, то индексы Миллера находятся аналогичным путем.

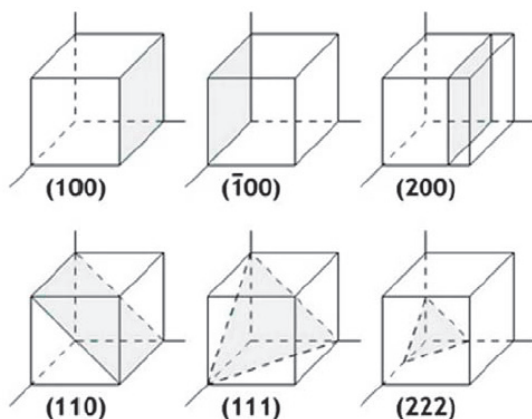


Рис. 1.2. Кристаллографические плоскости в кубической решетке, выражаемые индексами Миллера

Любое семейство параллельных плоскостей характеризуется определенным межплоскостным расстоянием d . Под межплоскостным расстоянием понимают кратчайшее расстояние между двумя соседними параллельными плоскостями данного семейства параллельных плоскостей.

Между индексами (hkl) семейства параллельных плоскостей, его межплоскостным расстоянием и периодами решетки существует математическая связь. Формула, показывающая зависимость между этими величинами, получила название квадратичной формы. Вид квадратичной формы различен в разных сингониях. Например, для кубической сингонии связь между параметром решетки a , межплоскостным расстоянием d и индексами плоскости (hkl) описывается следующей квадратичной формулой:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}. \quad (1.2)$$

Для тетрагональной сингонии:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}; \quad (1.3)$$

Для ромбической сингонии:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} ; \quad (1.4)$$

Для гексагональной сингонии:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3} \frac{(h^2 + kh + k^2)}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} . \quad (1.5)$$

Исходя из кристаллографических индексов, можно вычислить углы между направлениями в пространственной решетке, между плоскостями, между направлением и плоскостью, не прибегая к графическим построениям.

Формулы для определения углов:

- Угол φ между направлениями $[m_1n_1p_1]$ и $[m_2n_2p_2]$ выражается формулой

$$\cos \varphi = \frac{m_1m_2 + n_1n_2 + p_1p_2}{\sqrt{m_1^2 + n_1^2 + p_1^2} \sqrt{m_2^2 + n_2^2 + p_2^2}} . \quad (1.6)$$

- Угол φ между плоскостями $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$:

$$\cos \varphi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}} . \quad (1.7)$$

- Угол φ между направлением $[mnp]$ и плоскостью (hkl) :

$$\cos \varphi = \frac{hm + kn + lp}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \sqrt{m^2 + n^2 + p^2}} . \quad (1.8)$$

Формулы для определения объема элементарных ячеек кристалла:

♦ при кубической сингонии $V = a^3$, (1.9)

♦ при гексагональной сингонии $V = \frac{\sqrt{3}}{2} ac^2$, (1.10)

где a и c – параметры решетки.

По степени совершенства все материалы делят на монокристаллы, поликристаллы и кристаллы с аморфной структурой.

Монокристаллы, в идеальном случае, обладают абсолютной периодичностью расположения *элементарной ячейки*. Монокристалл это отдельный однородный кристалл, имеющий непрерывную кристаллическую решётку.

Поликристалл отличается от монокристалла тем, что состоит из множества мелких монокристаллов ориентированных по-разному. Так, поликристалл представляет собой агрегат мелких кристаллов какого-либо вещества, иногда называемых из-за неправильной формы кристаллитами или кристаллическими зёрнами.

Структуру аморфных кристаллов образуют хаотично расположенные одиночные и комплексно-связанные элементарные ячейки. Частным случаем аморфного состояния является стеклообразное состояние. В отличие от кристаллов, стабильно-аморфные вещества не затвердевают с образованием кристаллических граней.

Для нахождения числа элементарных ячеек в кристалле или числа атомов, приходящихся на элементарную ячейку, будут полезны следующие формулы:

Объем одного килограмм-моля кристалла V_0 можно определить с помощью следующего выражения

$$V_0 = \frac{\mu}{\rho} . \quad (1.11)$$

Число элементарных ячеек в одном килограмм-моле кристалла Z_0

$$Z_0 = \frac{V_0}{V} = \frac{k N_A}{n} , \quad (1.12)$$

где k – число одинаковых атомов в химической формуле соединения; N_A – число Авогадро; n – число одинаковых атомов, приходящихся на элементарную ячейку.

Тогда число элементарных ячеек в единице объема кристалла Z с учетом (1.11)

$$Z = \frac{Z_0}{V_0} = \rho \frac{k N_A}{n \mu} , \quad (1.13)$$

а параметр кубической решетки a по формуле

$$a = \sqrt[3]{\frac{n\mu}{k\rho N_A}}. \quad (1.14)$$

1.2. Примеры решения задач

Задача 1

Определить число узлов, приходящихся на одну элементарную ячейку в гранецентрированной кубической решетке.

Решение

Выделим элементарную ячейку в кубической решетке и определим, скольким соседним элементарным ячейкам принадлежит тот или иной узел выделенной ячейки (рис. 1.3). В этой ячейке имеются узлы двух типов: узлы типа A (находящиеся в вершинах куба) и узлы типа B (находящиеся на гранях куба в точке пересечения диагоналей).

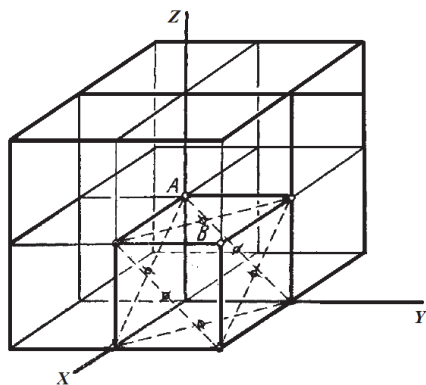


Рис. 1.3. Кубическая гранецентрированная решетка

Узел A принадлежит одновременно восьми элементарным ячейкам. Следовательно, в данную ячейку узел A входит с долей $1/8$. Узел B входит одновременно только в две ячейки и, следовательно, в данную ячейку узел B входит с долей $1/2$. Если учесть, что число узлов типа A

в ячейке равно восьми, а число узлов типа B равно шести, то есть равно числу граней, то общее число узлов, приходящихся на одну элементарную ячейку в гранецентрированной решетке, будет равно:

$$n = \frac{1}{8} \cdot 8 + \frac{1}{2} \cdot 6 = 1 + 3 = 4 \text{ узла.}$$

Так как число узлов равно числу атомов, то в соответствующей структуре на элементарную ячейку будет приходиться четыре атома.

Задача 2

Плоскость отсекает на осях координат отрезки $S_1 = 0,5$; $S_2 = 1,25$; $S_3 = 1,5$ в единицах длин ребер элементарной ячейки. Определить индексы Миллера в этой плоскости.

Решение

Набор параллельных атомных плоскостей (проходящих через атомы) можно охарактеризовать с помощью трех целых чисел – индексов Миллера. Эти числа связаны с длинами отрезков, отсекаемых плоскостью на осях координат. Пусть одна из плоскостей данной серии проходит через начало координат, помещенное на каком-либо атоме, а соседняя с ней плоскость отсекает на осях отрезки S_1 , S_2 , S_3 в единицах длин ребер элементарной ячейки. Тогда можно подобрать три наименьших числа h , k , l , относящихся друг к другу как $1/S_1$, $1/S_2$, $1/S_3$.

Составим отношения отрезков, обратных данным, в виде обыкновенных дробей и затем приведем их к общему знаменателю. В результате получим:

$$\begin{aligned} 1/S_1 : 1/S_2 : 1/S_3 &= 1/0,5 : 1/1,25 : 1/1,5 = 2 : 4/5 : 2/3 = \\ &= 30/15 : 12/15 : 10/15 = 30 : 12 : 10 = 15 : 6 : 5. \end{aligned}$$

Таким образом, индексы Миллера данной плоскости $(h \ k \ l) = (15 \ 6 \ 5)$.

Задача 3

Найти индексы Миллера плоскостей, проходящих через узловые точки кристаллической решетки с координатами $x_1 = 9$, $x_2 = 10$, $x_3 = 30$, если параметры решетки $a = 3$, $b = 5$, $c = 6$.

Решение

Отрезки, отсекаемые плоскостью на координатных осях, в единицах длин ребер:

$$S_1 = x_1/a = 3; \quad S_2 = x_2/b = 2; \quad S_3 = x_3/c = 5.$$

Подберем три наименьших числа $h \ k \ l$, таких, что

$$1/S_1 : 1/S_2 : 1/S_3 = 1/3 : 1/2 : 1/5 = h : k : l.$$

Приведем дроби к общему знаменателю:

$$10/30 : 15/30 : 6/30 = h : k : l.$$

Опустим общий знаменатель, и поскольку числа 10, 15, 6 не имеют общего множителя, то получим $(h; k; l) = (10; 15; 6)$.

Задача 4

Написать индексы Миллера для плоскости, содержащей узлы с индексами $[[200]]$, $[[010]]$ и $[[001]]$. Решетка кубическая, примитивная.

Решение

В данном случае узлы, принадлежащие плоскости, лежат на осях координат, и отрезки, отсекаемые на осях координат этой плоскостью, соответственно будут (рис. 1.4):

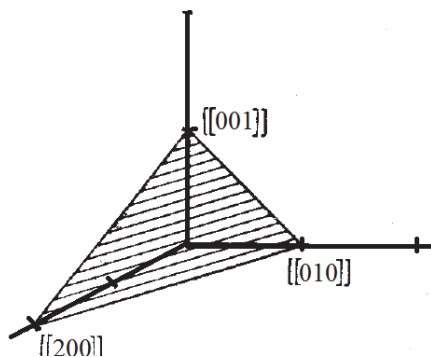


Рис. 1.4. Плоскость кубической примитивной решетки

$$S_1 = 2; \quad S_2 = 1; S_3 = 1.$$

В соответствии с общим правилом нахождения индексов Миллера напомним обратные значения полученных чисел: $1/2$; $1/1$; $1/1$ и приведем их к общему знаменателю.

Получим: $1/2; 2/2; 2/2.$

Опустим общий знаменатель, тогда искомые индексы Миллера:

$$(h; k; l) = (1; 2; 2).$$

Задача 5

Найти кристаллографические индексы плоскости, описываемой уравнением $3x + z = 1$.

Решение

Уравнение, описывающее плоскость представим в следующем виде

$$\frac{x}{1/3} + \frac{y}{1/0} + \frac{z}{1/1} = 1.$$

Тогда, $S_1 = 1/3$; $S_2 = \infty$; $S_3 = 1$.

В соответствии с общим правилом нахождения индексов Миллера напишем обратные значения полученных чисел:

$$h:k:l = 1/S_1 : 1/S_2 : 1/S_3.$$

Получаем искомые индексы Миллера:

$$(h; k; l) = (3; 0; 1).$$

Задача 6

Определить постоянную a и расстояние d между ближайшими соседними атомами кристалла кальция (решетка гранецентрированная кубической сингонии). Плотность кристалла кальция $\rho = 1,55 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$.

Решение

Параметр кубической решетки a связан с объемом V элементарной ячейки соотношением (1.9):

$$V = a^3.$$

В соответствии с (1.12)

$$V = \frac{V_0}{Z}.$$

Приравняв правые части уравнений, получим, что $a^3 = \frac{V_0}{Z_0}.$

Объем одного кило-моля кальция:

$$V_0 = \frac{\mu}{\rho},$$

где ρ – плотность кальция.

Число элементарных ячеек в одном кило-атоме:

$$Z_0 = \frac{N_A}{n},$$

где n – число атомов, приходящихся на одну ячейку.

Подставив V_0 и Z_0 , для параметра a , получим

$$a = \sqrt[3]{\frac{nA}{\rho N_A}}.$$

Учитывая решение задачи 1, что $n = 4$, и подставив числовые значения величин, получим

$$a = \sqrt[3]{\frac{nA}{\rho N_A}} = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot 40 \cdot 10^{-3}}{1,55 \cdot 10^3 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}}} = 5,56 \cdot 10^{-10} \text{ (м)}.$$

Расстояние между соседними атомами d можно рассчитать следующим образом:

$$d = \frac{a}{\sqrt{2}}.$$

Подставляя числовые значения,

$$d = \frac{5,56 \cdot 10^{-10}}{\sqrt{2}} = 3,93 \cdot 10^{-10} \text{ (м)}.$$

Задача 7

Медь ($\mu = 63,54 \cdot 10^{-3}$ кг/моль) имеет гранецентрированную кубическую решетку. Расстояние между ближайшими атомами меди составляет 0,255 нм. Определить плотность меди и параметр решетки.

Решение

Плотность кристалла меди найдем по формуле

$$\rho = \frac{\mu}{V_0},$$

где μ – молярная масса меди; V_0 – молярный объем, который равен объему одной элементарной ячейки, умноженной на число элементарных ячеек, содержащихся в одном моле кристалла Z_0 :

$$V_0 = a^3 Z_0 .$$

Число элементарных ячеек, содержащихся в одном моле кристалла, состоящего из одинаковых атомов, найдем, разделив постоянную Авогадро на число атомов, приходящихся на одну элементарную ячейку:

$$Z_0 = \frac{N_A}{n} .$$

Для кубической гранецентрированной решетки $n = 4$.

Подставляя, получим:

для V_0
$$V_0 = \frac{a^3 N_A}{n} ;$$

для ρ

$$\rho = \frac{\mu}{V_0} = \frac{\mu n}{a^3 N_A}$$

Расстояние между ближайшими соседними атомами связано с параметром решетки a соотношением:

$$d = \frac{a}{\sqrt{2}} .$$

Подставляя числовые значения в расчетные формулы, получаем

$$a = d\sqrt{2} = 0,255 \cdot 10^{-9} \sqrt{2} = 3,59 \cdot 10^{-10} \text{ (м)};$$

$$\rho = \frac{\mu}{V_0} = \frac{\mu n}{a^3 N_A} = \frac{63,54 \cdot 10^{-3} \cdot 4}{(3,59 \cdot 10^{-10})^3 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}} = 9,12 \cdot 10^3 \text{ (кг/м}^3\text{)}.$$

Задача 8

Определить число атомов в элементарной ячейке железа, кристаллизующегося в кубической системе. Ребро куба $a = 2,87 \text{ \AA}$, атомный вес железа – 55,84, плотность железа (ρ) – $7,8 \text{ г/см}^3$, $m_H = 1,65 \cdot 10^{-24} \text{ г}$.

Решение

Число атомов в элементарной ячейке определяется отношением массы элементарной ячейки к массе одного атома данного вещества.

Масса элементарной ячейки

$$m = \rho \cdot a^3.$$

Масса одного атома железа

$$m_{(\text{Fe})} = A \cdot m_H,$$

где A – атомный вес железа; m_H – масса атома водорода.

Число атомов в элементарной ячейке найдем как

$$N = \frac{\rho \cdot a^3}{A \cdot m_H}.$$

Подставив числовые значения, получаем

$$N = \frac{\rho \cdot a^3}{A \cdot m_H} = \frac{7,8 \cdot 2,87^3 \cdot 10^{-24}}{55,84 \cdot 1,65 \cdot 10^{-24}} \approx 2.$$

Таким образом, на элементарную ячейку железа приходится 2 атома.

Задача 9

Определить угол между направлениями $[1 \bar{1} 0]$ и $[1 \bar{1} 2]$ в случае кубической сингонии.

Решение

Угол φ между направлениями $[m_1 n_1 p_1]$ и $[m_2 n_2 p_2]$ в случае кубической сингонии выражается формулой

$$\cos \varphi = \frac{m_1 m_2 + n_1 n_2 + p_1 p_2}{\sqrt{m_1^2 + n_1^2 + p_1^2} \sqrt{m_2^2 + n_2^2 + p_2^2}}.$$

После подстановки получаем

$$\cos \varphi = \frac{1 \cdot 1 + (-1) \cdot (-1) + 0 \cdot 2}{\sqrt{1^2 + (-1)^2 + 0^2} \sqrt{1^2 + (-1)^2 + 2^2}} \approx 0,57 .$$

$$\varphi = \arccos 0,57 \approx 55,24^\circ .$$

Задача 10

Определить угол между плоскостью (101) и направлением $[1\bar{1}2]$ в случае кубической сингонии.

Решение

Угол φ между направлением $[mnp]$ и плоскостью (hkl) в случае кубической сингонии выражается формулой

$$\cos \varphi = \frac{hm + kn + lp}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \sqrt{m^2 + n^2 + p^2}} .$$

После подстановки получаем

$$\cos \varphi = \frac{1 \cdot 1 + 0 \cdot (-1) + 1 \cdot 2}{\sqrt{1^2 + 0^2 + 1^2} \cdot \sqrt{1^2 + (-1)^2 + 2^2}} \approx 0,86 .$$

$$\varphi = \arccos 0,86 = 59,31^\circ .$$

Контрольные вопросы

1. Что такое кристаллическая решетка?
2. Назовите основные типы кристаллических решеток.
3. Какими величинами описывается кристаллическая решетка?
4. Что характеризует период кристаллической решетки?
5. Что называют элементарной ячейкой?
6. Что такое решетка Бравэ? Основные типы решеток Бравэ.
7. Назовите основные параметры решетки Бравэ.
8. Дайте определение индексов Миллера? Опишите основные правила нахождения индексов Миллера.
9. Как записываются координаты узла кристаллической решетки, кристаллографического направления, плоскости?
10. Что характеризует межплоскостное расстояние? Связь межплоскостного расстояния с основным параметром для кубической решетки.
11. Назовите особенности монокристаллов, поликристаллов и аморфного состояния.

Список литературы

1. Давыдов А. С. Теория твердого тела / А. С. Давыдов. – Гл. 1. М.: Наука, 1976.
2. Джонс Г. Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах / Г. Джонс. М.: Мир, 1968.
3. Займан Дж. Принципы теории твердого тела / Дж. Займан. – Гл. 1. М.: Мир, 1974.
4. Елифанов Г. И. Физика твердого тела / Г. И. Елифанов. М.: Высш. шк., 1977. – 288 с.
5. Трофимова Т. И. Курс физики / Т. И. Трофимова. – М.: Высш. шк., 1997. – 542 с.

2. ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

2.1. Теоретические сведения

Любое твердое тело представляет собой систему, состоящую из огромного числа частиц, для описания состояния которой существует два способа: *термодинамический* и *статистический*.

В основе термодинамического описания состояния системы лежит вопрос об изменении энергии в ней.

В общем случае закон сохранения энергии записывается в следующем виде:

$$dE = TdS - PdV + \mu dN, \quad (2.1)$$

где E – внутренняя энергия системы; dN – изменение числа частиц в системе; T и P – температура и давление; dS и dV – изменение энтропии и объема системы; μ – *химический потенциал системы*.

Для замкнутой системы постоянного объема, которая не получает и не отдает тепло, $dS = 0$ и $dV = 0$. Тогда $dE = \mu dN$. Отсюда $\mu = dE / dN$. Таким образом, *химический потенциал* равен изменению энергии изолированной системы постоянного объема при изменении в ней числа частиц на единицу.

Основной особенностью статистических закономерностей является их вероятностный характер.

По характеру поведения в системе все частицы можно разделить на две группы: *фермионы* (к ним относятся все частицы с полуцелым спином $S = 1/2, 3/2$ – электроны, протоны, нейтроны) и *бозоны* (с целым спином $S = 0, 1$ – фотоны, фононы, мезоны).

Специфичность поведения данных микрочастиц проявляется только в случае их частых взаимодействий, имеется в виду попадание двух частиц в одно и то же энергетическое поле. Пусть на N частиц приходится G различных состояний, в которых может находиться отдельная частица. Тогда если $N/G \ll 1$, то частицы встречаются редко, то есть различных вакантных состояний много больше числа микрочастиц, и в этом случае специфика фермионов и бозонов проявиться не может, так как в распоряжении каждой частицы имеется много различных свободных состояний. Условие $N/G \ll 1$ называется *условием невырожденности*, а сами системы – невырожденными. Свойства невырожденных коллективов частиц описывает *классическая статистика Максвелла – Больцмана*.

Если выполняется условие $N/G \sim 1$, то в этом случае специфика частиц проявляется в полной мере, оказывая влияние на свойства всей системы в целом. Такие коллективы частиц называются *вырожденными*. Статистика, изучающая свойства вырожденных коллективов, получила название квантовой. Квантовую статистику фермионов связывают с именами Э. Ферми и П. Дирака – распределение Ферми – Дирака, а статистику бозонов – с именами Ш. Бозе и А. Эйнштейна – распределение Бозе – Эйнштейна.

Чтобы задать состояние частицы, необходимо задать состояние их координат и составляющих импульсов или энергии частиц. Связь между этими двумя типами величин осуществляет *полная статистическая функция распределения*

$$N(E)dE, \quad (2.2)$$

которая выражает число частиц с энергией от E до $E + dE$, в системе, состояние которой описывается термодинамическими параметрами μ и T .

Эту функцию можно представить в виде произведения числа состояний $g(E)dE$, приходящихся на интервал энергии dE , на вероятность заполнения этих состояний частицами – $f(E)$:

$$N(E)dE = f(E) g(E) dE. \quad (2.3)$$

Функцию $f(E)$, определяющую вероятность заполнения частицами данных состояний или среднее число частиц, находящихся в данном состоянии, называют *функцией распределения*.

Плотностью состояний $g(E)$ называется число состояний микро-частицы, приходящихся на единичный интервал энергий:

$$g(E) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E} \quad (2.4)$$

Статистический расчет для невырожденного коллектива частиц приводит к следующему виду $f(E)$:

$$f(E) = e^{\frac{\mu}{kT}} e^{-\frac{E}{kT}}, \quad (2.5)$$

где k – постоянная Больцмана; μ – химический потенциал; E – энергия частицы.

Величина μ в этом случае

$$\mu = kT \ln \left[\frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m kT} \right)^{3/2} \right]. \quad (2.6)$$

Подставив это выражение в формулу (2.5), получаем

$$f(E) = \frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{E}{kT}}. \quad (2.7)$$

Умножая функцию распределения $f(E)$ на число состояний $g(E)dE$, получаем полную функцию распределения частиц по энергиям:

$$N(E)dE = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} e^{\frac{\mu}{kT}} e^{-\frac{E}{kT}} \sqrt{E} dE \quad (2.8)$$

А после подстановки выражения для величины μ

$$N(E)dE = \frac{2N}{\sqrt{\pi(kT)^3}} e^{-\frac{E}{kT}} \sqrt{E} dE. \quad (2.9)$$

Полученную формулу называют полной *функцией распределения Максвелла – Больцмана*.

В металлах электронный газ всегда вырожден, поэтому он описывается квантовой статистикой Ферми – Дирака.

Невырожденное состояние электронного газа может быть получено не только путем повышения его температуры, но и путем уменьшения концентрации частиц n . При $n \approx 10^{22} \text{ м}^{-3}$ электронный газ становится невырожденным.

Функция распределения для вырожденного газа фермионов имеет следующий вид:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}. \quad (2.10)$$

Здесь μ – химический потенциал вырожденного газа фермионов, который в применении к такому газу чаще называют *энергией Ферми*.

Из (2.10) видно, что при $E = \mu$ функция $f(E) = 1/2$ при любой температуре $T \neq 0$. Поэтому со статистической точки зрения уровень Ферми – это энергетический уровень, вероятность заполнения которого равна $1/2$.

Функцию (2.10) называют функцией Ферми–Дирака. Наглядное представление о ней можно получить, рассматривая вырожденный электронный газ в металлах при абсолютном нуле.

Металл для свободных электронов является своеобразной потенциальной ямой, выход из которой требует затрат энергии на преодоление сил связи, удерживающих электроны в металле.

В соответствии с принципом Паули, на каждом энергетическом уровне могут находиться два электрона с противоположными спинами. Если электронный газ содержит N электронов, то последним занятым окажется уровень $N/2$. Этот уровень называется уровнем Ферми для вырожденного электронного газа. Он соответствует максимальной энергии E_F , которой может обладать электрон в металле при абсолютном нуле. Ее называют *энергией Ферми*.

Таким образом, при абсолютном нуле все состояния с энергией $E < E_F$ заняты электронами, состояния с энергией $E > E_F$ – свободны (рис. 2.1). Другими словами, при $T = 0^\circ\text{K}$ вероятность заполнения электронами состояний с энергией $E < E_F$ равна 1, вероятность заполнения состояний с энергией $E > E_F$ равна нулю. Данный результат получается из (2.10), если считать, что при $T = 0^\circ\text{K}$ $\mu = E_F$

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}. \quad (2.11)$$

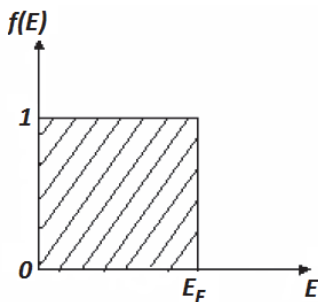


Рис. 2.1. График функции распределения Ферми – Дирака при $T = 0^\circ\text{K}$

Умножая (2.11) на число состояний $g(E)dE$, получим *полную функцию распределения Ферми – Дирака при абсолютном нуле температуры*:

$$N(E)dE = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E} dE . \quad (2.12)$$

Интегрируя выражение (2.12) в пределах от 0 до E_F , получаем

$$N = \frac{8\pi V}{3h^3} (2m)^{3/2} E_F^{3/2} . \quad (2.13)$$

Тогда энергия Ферми может быть определена как

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3} ,$$

или

$$E_F = \frac{h^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{2/3} , \quad (2.14)$$

где $n = N/V$ – концентрация электронного газа в металле.

Зная функцию распределения электронов по энергиям, можно определить среднюю энергию электронов $\langle E_0 \rangle$ при $T = 0^\circ\text{K}$. Расчет показывает, что $\langle E_0 \rangle = 3/5 E_F \approx 3 \text{ эВ}$.

Наконец, можно определить так называемую *температуру Ферми* T_F , которая определяется из отношения: $T_F = E_F/k$. Она показывает, при какой температуре обычный невырожденный газ с массой молекул, равной массе электрона, имел бы энергию теплового движения kT , равную энергии Ферми E_F .

При повышении температуры электроны подвергаются тепловому возбуждению и переходят на более высокие энергетические уровни, вследствие чего меняется характер их распределения по состояниям.

Интегрируя полную функцию распределения Ферми–Дирака $f(E)g(E)dE$ по энергии, можно найти полное число свободных электронов в металле N :

$$N = \int_0^\infty f(E)g(E)dE = \frac{4\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty E^{1/2} dE \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} . \quad (2.15)$$

Приближенное вычисление данного интеграла приводит к следующей зависимости $\mu(T)$:

$$\mu = E_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^2 \right]. \quad (2.16)$$

2.2. Примеры решения задач

Задача 1

Получите выражение для функции распределения электронов по состояниям с различной энергией.

Решение

Рассмотрим в качестве примера неупругие столкновения равновесного электронного газа с атомом примеси, внедренным в кристаллическую решетку металла. Атом примеси может находиться в двух состояниях, энергию которых мы положим равной 0 и ε .

Из множества процессов столкновений рассмотрим тот, в результате которого электрон переходит из состояния k с энергией E в состояние k' с энергией $E + \varepsilon$. Атом примеси при этом переходит с уровня с энергией ε на уровень с энергией, равной нулю.

Вероятность P_{kk}' перехода $k(E) \rightarrow k'(E + \varepsilon)$ пропорциональна:

- 1) вероятности $f(E)$ того, что состояние $k(E)$ занято электроном;
- 2) вероятности $(1 - f(E + \varepsilon))$ того, что состояние $k'(E + \varepsilon)$ свободно;
- 3) вероятности $p(\varepsilon)$ того, что атом примеси находится в состоянии с энергией ε .

Таким образом,

$$P_{kk}' \sim f(E) (1 - f(E + \varepsilon)) p(\varepsilon).$$

Вероятность обратного $P_{k'k}$ процесса пропорциональна выражению

$$P_{k'k} \sim f(E + \varepsilon) (1 - f(E)) p(0),$$

где $p(0)$ – вероятность того что атом примеси находится в состоянии с энергией, равной нулю.

В равновесном состоянии вероятности переходов $\rightarrow kk'$ и $'\rightarrow kk$ должны быть одинаковыми. Следовательно,

$$f(E) (1 - f(E + \varepsilon)) p(\varepsilon) = f(E + \varepsilon) (1 - f(E)) p(0).$$

Отсюда

$$\frac{f(E + \varepsilon)}{1 - f(E + \varepsilon)} \cdot \frac{1 - f(E)}{f(E)} = \frac{p(\varepsilon)}{p(0)} = e^{-\varepsilon / kT}.$$

Это уравнение должно выполняться при любой температуре. Это произойдет, если положить $\frac{1 - f(E)}{f(E)} = e^{(\varepsilon - \mu) / kT}$, где μ – величина, не зависящая от E . Соответственно

$$\frac{f(E + \varepsilon)}{1 - f(E + \varepsilon)} = e^{-[(E + \varepsilon) - \mu] / kT}.$$

Решив это уравнение относительно $f(E)$, получим для функции распределения электронов по состояниям с различной энергией следующее выражение:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E - \mu) / kT} + 1}.$$

В соответствии со смыслом функции величина $f(E)$ представляет собой среднее число электронов $\langle n \rangle$, находящихся в состоянии с энергией E .

Задача 2

Определите функцию распределения Ферми – Дирака при $T \neq 0^\circ K$ для электронов, находящихся на уровне Ферми.

Решение

Функция распределения электронов по состояниям с различной энергией имеет при абсолютном нуле вид, представленный на рис. 2.1, и описывается следующим выражением:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E - \mu) / kT} + 1}.$$

В соответствии с принципом Паули, на каждом энергетическом уровне могут находиться два электрона с противоположными спинами. Последним занятым окажется уровень $N/2$, называемый уровнем Ферми для вырожденного электронного газа. Он соответствует максимальной энергии E_F (энергии Ферми), которой может обладать электрон в металле при абсолютном нуле температуры.

Тогда, если считать, что при $T = 0^\circ\text{K}$ $\mu = E_F$, функция распределения будет иметь следующий вид:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1}.$$

Исследуя свойства этой функции, получим

при абсолютном нуле $f(E) = 1$, если $E < E_F$;

$f(E) = 0$, если $E > E_F$.

Таким образом, при $T = 0^\circ\text{K}$ уровень Ферми совпадает с верхним заполненным электронами уровнем $E_F(0)$.

При $T \neq 0^\circ\text{K}$, независимо от значения температуры, при $E = E_F$ функция $f(E) = 1/2$ (рис. 2.2).

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} = \frac{1}{e^0 + 1} = \frac{1}{2}.$$

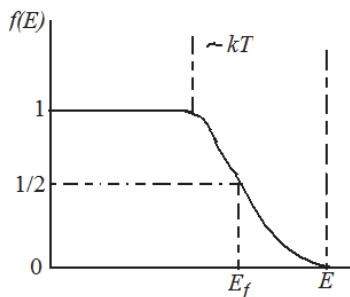


Рис. 2.2. График функции распределения Ферми – Дирака

Следовательно, при $T \neq 0^\circ\text{K}$ уровень Ферми совпадает с тем энергетическим уровнем, вероятность заполнения которого равна половине.

Задача 3

При абсолютном нуле уровень Ферми для меди 7,04 эВ. Определить значение уровня Ферми при 20 °К.

Решение

Значение E_F можно найти из условия, что полное число электронов, заполняющих уровни, должно равняться числу nV свободных электронов в кристалле (n – плотность электронов; V – объем кристалла).

Количество состояний, приходящееся на интервал энергий dE , равно $g(E)dE$, где $g(E)$ – плотность состояний.

Среднее число электронов, находящихся в случае теплового равновесия в этих состояниях, определяется выражением

$$f(E)g(E)dE.$$

Интеграл от этого выражения определяет полное число электронов в кристалле:

$$\int_0^{\infty} f(E)g(E)dE = nV.$$

Число состояний, приходящееся на единичный интервал энергии равно

$$g(E) = 4\pi V \frac{(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} E^{1/2}.$$

Функция распределения Ферми – Дирака:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E - E_F) / kT} + 1}.$$

После подстановки в интеграл получаем

$$4\pi V \frac{(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{\infty} \frac{E^{1/2} dE}{e^{\frac{E - E_F}{kT}} + 1} = nV.$$

При условии $kT \ll E_F$ удается найти приближенное решение интеграла.

В результате для уровня Ферми получается выражение:

$$E_F \approx E_F(0) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_F(0)} \right)^2 \right].$$

Вычисляем при $T = 20^\circ \text{К}$

с учетом постоянной Больцмана $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ (Дж/К):

$$kT = 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 20 = 2,76 \cdot 10^{-22} \text{ (Дж)} = 1,7 \cdot 10^{-3} \text{ (эВ)}.$$

$$kT \ll 7,04 \text{ эВ}.$$

Получаем
$$E_F = 7,04 \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{1,7 \cdot 10^{-3}}{7,04} \right)^2 \right] = 7,039 \text{ (эВ)}.$$

Задача 4

Объясните, при каких условиях можно применять статистику Максвелла – Больцмана к электронам в металле. Пользуясь распределением Ферми – Дирака, получите распределение Максвелла – Больцмана.

Решение

Электроны проводимости в металле можно рассматривать как идеальный газ, подчиняющийся распределению Ферми – Дирака (2.10):

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} + 1}.$$

Для фермионов (электроны являются фермионами) среднее число частиц в квантовом состоянии и вероятность заселенности квантового состояния совпадают, так как квантовое состояние либо может быть не заселено, либо в нем будет находиться одна частица. Это означает, что для фермионов $\langle N(E) \rangle = f(E)$, где $f(E)$ – функция распределения электронов по состояниям.

Для металлов при не слишком высоких температурах выполняется неравенство $kT \ll E_F$. Это означает, что электронный газ в металлах практически всегда находится в состоянии сильного вырождения. Температура вырождения T_0 находится из условия $kT_0 = E_F$. Она определяет границу, выше которой квантовые эффекты перестают быть существен-

ными. Соответствующие расчеты показывают, что для электронов в металле $T_0 \approx 10^4$ °К, то есть для всех температур, при которых металл может существовать в твердом состоянии, электронный газ в металле вырожден.

При температурах, отличных от 0 °К, функция распределения Ферми – Дирака плавно изменяется от 1 до 0 в узкой области (порядка kT) в окрестности E_F (рис. 2.3). Это объясняется тем, что при $T > 0$ °К небольшое число электронов с энергией, близкой к E_F , возбуждается за счет теплового движения и их энергия становится больше E_F . Вблизи границы Ферми при $E < E_F$ заполнение электронами меньше единицы, а при $E > E_F$ – больше нуля. В тепловом движении участвует лишь небольшое число электронов, например, при комнатной температуре $T \approx 300$ °К и температуре вырождения $T_0 = 3 \cdot 10^4$ °К – это 10^{-5} от общего числа электронов.

Если $E - E_F \gg kT$ («хвост» функции распределения), то единицей в знаменателе (2.10) можно пренебречь по сравнению с экспонентой, и тогда распределение Ферми – Дирака переходит в распределение Максвелла – Больцмана. Таким образом, при $E - E_F \gg kT$, то есть при больших значениях энергии, к электронам в металле применима классическая статистика, в то же время, когда $E - E_F \ll kT$, к ним применима только квантовая статистика Ферми – Дирака.

Таким образом, при $E - E_F \gg kT$ получим

$$\langle N(E) \rangle = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} + 1} = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT}} = e^{-\frac{(E-E_f)}{kT}} = e^{-\frac{\mu}{kT}} e^{-\frac{E_i}{kT}} = A e^{-\frac{E_i}{kT}}.$$

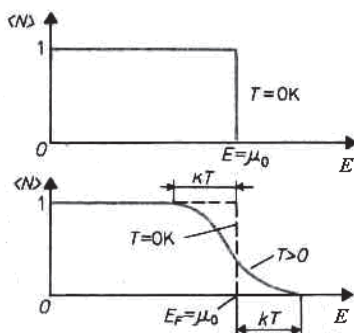


Рис. 2.3. График функции распределения Ферми – Дирака

Задача 5

Определите функцию распределения для электронов, находящихся на энергетическом уровне E , для случая $E - E_F \ll kT$, пользуясь: 1) статистикой Ферми – Дирака; 2) статистикой Максвелла – Больцмана.

Решение

Функция распределения Ферми – Дирака имеет вид:

$$\langle N(E) \rangle = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1}.$$

Функция распределения Максвелла – Больцмана имеет вид:

$$\langle N(E) \rangle = A e^{-\frac{E}{kT}}.$$

При выполнении условия $E - E_F \ll kT$ в случае статистики Ферми – Дирака получим

$$\langle N(E) \rangle = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \Big|_{E-E_F \ll kT} = \frac{1}{2};$$

в случае статистики Максвелла – Больцмана получим

$$\langle N(E) \rangle = A e^{-\frac{E}{kT}} = e^{-\frac{E_F}{kT}} e^{-\frac{E-E_F}{kT}} = e^{-\frac{(E-E_F)}{kT}} \Big|_{E-E_F \ll kT} = 1.$$

Задача 6

Кусок металла объемом $V = 20 \text{ см}^3$ находится при температуре $T = 0^\circ\text{K}$. Определить число ΔN свободных электронов, импульсы которых отличаются от максимального импульса p_{max} не более чем на $0,1 p_{\text{max}}$. Энергия Ферми $E_F = 5 \text{ эВ}$.

Решение

Для того чтобы установить распределение свободных электронов в металле по импульсам, воспользуемся распределением Ферми для свободных электронов при $T = 0^\circ\text{K}$ (2.12):

$$dN(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} E^{1/2} dE.$$

Так как $dN(E)$ есть число электронов в единице объема, энергии которых заключены в интервале значений от E до $E + dE$ ($E < E_F$), то оно должно быть равно числу электронов $dN(p)$ в единице объема, заключенных в интервале значений импульса от p до $p + dp$, то есть

$$dN(p) = dN(E).$$

При этом должно соблюдаться следующее условие. Данной энергии E соответствует определенный импульс $p\left(E = \frac{p^2}{2m}\right)$ и интервалу энергии dE отвечает соответствующий ему интервал импульсов $dp\left(dE = \frac{p}{m} dp\right)$. Заметив, что $E^{1/2} = p/(2m)^{1/2}$, подставим в правую часть последнего равенства выражение для распределения Ферми с заменой E на p и dE на dp в соответствии с полученными соотношениями. Получаем

$$dN(p) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \frac{p}{(2m)^{1/2}} \frac{p}{m} dp.$$

После сокращений получим искомое распределение свободных электронов в металле по импульсам при $T = 0^\circ\text{K}$:

$$dN(p) = \frac{1}{\pi^2 h^3} p^2 dp.$$

Число электронов в единице объема, импульсы которых заключены в интервале от $p_{\max} - 0,1p_{\max}$ до p_{\max} , найдем интегрированием в соответствующих пределах:

$$\Delta N = \frac{1}{\pi^2 h^3} \int_{0,9p_{\max}}^{p_{\max}} p^2 dp = \frac{1}{3\pi^2 h^3} p_{\max}^3 \left[1 - (0,9)^3\right],$$

или

$$\Delta N = \frac{0,271}{3\pi^2} \frac{p_{\max}^3}{h^2}.$$

Учитывая, что максимальный импульс p_{\max} и максимальная энергия электронов в металле (E_F) при $T = 0^\circ\text{K}$ связаны соотношением $p_{\max}^2 = 2mE_F$, найдем искомое число ΔN свободных электронов в металле:

$$\Delta N = \frac{0,271}{3\pi^2 h^3} (2mE_F)^{3/2} V, \text{ или } \Delta N = \frac{0,271}{3\pi^2} \left(\frac{3mE_F}{h^2} \right)^{3/2} V.$$

$$E_F = 5 \text{ эВ} = 8 \cdot 10^{-19} \text{ Дж.}$$

Подставив числовые значения, получим

$$\begin{aligned} \Delta N &= \frac{0,271}{3\pi^2} \left(\frac{3mE_F}{h^2} \right)^{3/2} V = \\ &= \frac{0,271}{3\pi^2} \sqrt{\left(\frac{3 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 8 \cdot 10^{-19}}{1,05 \cdot 10^{-31}} \right)^3} \cdot 2 \cdot 10^{-5} = 2,9 \cdot 10^{23} \text{ (электронов)}. \end{aligned}$$

Задача 7

Определить вероятность того, что электрон в металле займет энергетическое состояние, находящееся в интервале $\Delta E = 0,05 \text{ эВ}$ ниже уровня Ферми и выше уровня Ферми, для двух температур:
1) $T_1 = 290^\circ\text{K}$; 2) $T_2 = 58^\circ\text{K}$.

Решение

Будем считать, что ΔE мало по сравнению с уровнем Ферми. Вблизи него вероятность обнаружить частицу в интервале ΔE относительно уровня Ферми равна:

$$P = 1 - e^{-\frac{\Delta E}{kT}}.$$

Подставляя для разных значений температур, получим

$$P_2 = e^{-\frac{\Delta E}{kT_2}} = e^{-\frac{0,05 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 58}} = 4,6 \cdot 10^{-5} \quad P_1 = e^{-\frac{\Delta E}{kT_1}} = e^{-\frac{0,05 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 298}} = 4,6 \cdot 10^{-5}.$$

Задача 8

Определить число электронных состояний в единице объема металла с энергией $0,3 - 0,4$ эВ.

Решение

Число электронных состояний в единице объема металла можно оценить следующим образом:

$$\frac{dV_E}{V} = 4\pi \frac{(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} E^{1/2} dE.$$

Здесь dV_E – есть число состояний с энергией, заключенной в интервале от E до $E + dE$.

Тогда
$$\Delta V = 4\pi \frac{(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{E} \Delta E$$

$$E = 0,3 \text{ эВ} \quad \Delta E = 0,4 - 0,3 = 0,1 \text{ эВ.}$$

Подставив числовые значения, получаем

$$\Delta V = \frac{4\pi (2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31})^{3/2}}{(2\pi \cdot 1,05 \cdot 10^{-34})^3} (0,3 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19})^{1/2} \cdot 0,1 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} = 3,8 \cdot 10^{26} (\text{м}^{-3}).$$

Задача 9

Найти максимальную энергию электронов в металле при $T = 0$ °К.

Решение

Энергия Ферми – это максимальная кинетическая энергия электронов в металле при $T = 0$ °К.

Число электронных состояний в единице объема:

$$\frac{dV_E}{V} = 4\pi \frac{(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} E^{1/2} dE.$$

Здесь dV_E есть число состояний с энергией, заключенной в интервале от E до $E + dE$.

Полное число электронов в единице объема:

$$n = \int_0^{E_{\max}} dV_E = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{E_{\max}} E^{1/2} dE = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{E_{\max}^{3/2}}{3/2} = \frac{8\pi(2m)^{3/2}}{3(2\pi\hbar)^3} E_{\max}^{3/2}.$$

Тогда для энергии Ферми при абсолютном нуле температуры имеем

$$E_{\max} = \frac{n^{2/3} 3^{2/3} (2\pi\hbar)^2}{(8\pi)^{2/3} (2m)} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}.$$

После подстановки числовых значений получаем

$$E_{\max} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-34})^2 (3(3,14)^2 \cdot 6 \cdot 10^{28})^{2/3}}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}} = 8,8 \cdot 10^{-19} \text{ (Дж)} = 5,5 \text{ (эВ)}.$$

Задача 10

Концентрация свободных электронов натрия $2,5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$. Определить температуру Ферми и скорость электронов на уровне Ферми.

Решение

Нагревание металла сопровождается переходом электронов с уровней, примыкающих к уровню Ферми, на уровни, лежащие выше $E_F(0)$.

В процессе нагревания будет участвовать доля электронов, равная приблизительно T/T_F , где $T_F = \frac{E_F(0)}{k}$ — называется температурой Ферми. $E_F(0)$ — значение энергии Ферми при абсолютном нуле температуры, согласно (2.14), имеет следующий вид:

$$E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m_*} (3\pi^2 n)^{2/3}.$$

Тогда

$$T_F = \frac{\hbar^2}{2mk} (3\pi^2 n)^{2/3}.$$

Подставляя числовые значения, получаем

$$T_F = \frac{(1,05 \cdot 10^{-34})^2 (3 \cdot (3,14)^2 \cdot 2,5 \cdot 10^{28})^{2/3}}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}} = 3,6 \cdot 10^4 \text{ (K)}.$$

Скорость электронов на уровне Ферми можно определить, принимая во внимание, что энергия Ферми – это максимальная кинетическая энергия электронов в металле при $T = 0$ °K.

Тогда

$$V_F = \sqrt{2E_F/m} = \sqrt{\frac{2h^2(3\pi^2n)^{2/3}}{2m^2}} = \frac{h}{m}(3\pi^2n)^{1/3}.$$

После подстановки получаем

$$V_F = \frac{1,05 \cdot 10^{-34} (3\pi^2 \cdot 2,5 \cdot 10^{28})^{2/3}}{9,1 \cdot 10^{-31}} = 1,04 \cdot 10^6 \text{ (м/с)}.$$

Контрольные вопросы

1. Что такое бозоны и фермионы?
2. Каков физический смысл функция распределения?
3. Что характеризует плотность состояний?
4. Каково заполнение электронами энергетических уровней ниже уровня Ферми; выше уровня Ферми и самого уровня ферми?
5. В чем состоит принцип Паули?
6. Что такое энергия Ферми?
7. Как оценить полное число свободных электронов в металле?
8. Запишите функцию распределения Ферми – Дирака.
9. Запишите функцию распределения Максвелла – Больцмана.
10. Что определяет температура Ферми, ее физический смысл?

Список литературы

1. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел / Ч. Киттель. – Гл. 2–4,7,15. М.: Наука, 1967.
2. Хакен Х. Квантовая теория твердого тела / Х. Хакен. – Главы 4,5. М.: Наука, 1980.
3. Займан Дж. Принципы теории твердого тела / Дж. Займан. – Гл. 2–6. М.: Мир, 1974.
4. Харрисон У. Теория твердого тела / У. Харрисон. – Гл. 2–4. М.: Мир, 1972.

3. ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

3.1. Теоретические сведения

Атомы твердых тел совершают тепловые колебания около положений равновесия.

Для описания индивидуальных колебаний частиц рассматривают их коллективное движение в кристалле, как в пространственно упорядоченной системе. Такое коллективное движение называется *нормальным колебанием решетки*. Число нормальных колебаний, которое может возникнуть в решетке, равно числу степеней свободы частиц кристалла, то есть $3N$, где N – число частиц в кристалле.

По аналогии с непрерывной упругой средой спектр колебаний можно представить в виде дискретного набора стоячих волн (нормальных колебаний) с длинами волн $2L, 2L/2, 2L/3, 2L/4 \dots 2a$, где L – длина кристалла, a – межатомное расстояние. Самая малая длина волны колебаний кристалла $\lambda_{\min} = 2a$, так как более коротких волн в решетке существовать не может. Колебание с длиной волны $\lambda_{\max} = 2L$ – называется основной модой. Мода колебаний – нормальное колебание с определенной частотой, направлением волнового вектора и поляризацией.

Каждое нормальное колебание характеризуется определенной частотой, с которой осциллируют все элементы системы. Набору длин волн от $\lambda_{\max} = 2L$ до $\lambda_{\min} = 2a$ соответствует набор частот $\omega_{\min}, 2\omega_{\min}, 3\omega_{\min} \dots \omega_{\max}$. В системах, состоящих из N связанных гармонических осцилляторов (колеблющихся частиц в кристалле), число нормальных колебаний

$$2L/(2a) = N a/a = N.$$

Переходя от классического к квантовому рассмотрению, каждую моду нормальных колебаний можно представить как квантовый гармонический осциллятор. Таким образом, собственную энергию движения атомов в кристалле можно представить в виде суммы энергий независимых гармонических осцилляторов с частотами, соответствующими набору частот нормальных колебаний кристаллической решетки.

Одним из центральных вопросов при теоретическом описании тепловых свойств является понятие о фононах и статистике фононов.

Каждое нормальное колебание несет с собой энергию и импульс. Нормальное колебание решетки можно представить как колебание свободного осциллятора, масса которого равна массе атомов твердого тела, совершающих колебание с частотой ω .

Минимальная порция энергии, которую может поглотить или испустить решетка при тепловых колебаниях, соответствует переходу возбуждаемого нормального колебания с данного энергетического уровня на близлежащий соседний уровень и равна:

$$\varepsilon_{\Phi} = \hbar\omega. \quad (3.1)$$

Эту порцию или квант энергии тепловых колебаний решетки называют *фононом*.

Волновые свойства фононов зависят от частоты ω и длины волны λ . Механические свойства фонона определяются соотношениями де Бройля:

квазиимпульс $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, где $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновой вектор.

Таким образом, фононы – элементарные носители движения в системе частиц, входящих в кристаллическую решетку и связанных друг с другом силами взаимодействия.

Волновой вектор (и импульс) фонона может принимать только дискретные значения k_i с интервалом $\Delta k_0 = 2\pi/\lambda$. В трехмерном случае объем одного состояния в \vec{k} -пространстве равен $\Delta k_0^3 = (2\pi/\lambda)^3$. Поскольку $\lambda \gg a$, то объем k – состояния, характеризующий дискретность спектра, мал, и спектр можно считать квазинепрерывным, а минимально возможное значение по модулю волнового вектора равным нулю. В этих условиях можно говорить о законе дисперсии фононов (зависимости частоты от волнового вектора $\omega(k)$), как некоторой непрерывной функции волнового вектора \vec{k} .

Фононы являются бозе-частицами: число фононов в одном состоянии не лимитировано принципом Паули и может быть сколь угодно большим.

Среднее число фононов в каждом состоянии зависит только от температуры и от энергии фонона, то есть его частоты.

Для описания фононов пользуются функцией распределения Бозе – Эйнштейна:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\varepsilon_{\Phi}/kT} - 1} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}. \quad (3.2)$$

Функция распределения $g(\omega)$ нормальных колебаний по частотам, определяющая частотный спектр колебаний, имеет следующий вид:

$$g(\omega) = \frac{dZ}{d\omega} = \frac{3V}{2\pi^2 v^3} \omega^2, \quad (3.3)$$

где Z – число нормальных колебаний.

Так как общее число нормальных колебаний, которое может возникнуть в решетке, равно $3N$, то функция $g(\omega)$ удовлетворяет следующему условию нормировки:

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = 3N, \quad (3.4)$$

где ω_D – максимальная частота, ограничивающая спектр нормальных колебаний.

Тогда получим, что

$$\frac{V \omega_D^3}{2\pi^2 v^3} = 3N. \quad (3.5)$$

Из (3.5) находим так называемую *характеристическую дебаевскую частоту*:

$$\omega_D = v \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N}{V}}. \quad (3.6)$$

А выражение $k\theta_D = \hbar\omega_D$ позволит определить *характеристическую температур Дебая*:

$$\theta_D = \hbar\omega_D / k, \quad (3.7)$$

где k – постоянная Больцмана.

При температуре Дебая в твердом теле возбуждается весь спектр нормальных колебаний, включая и колебания с максимальной частотой ω_D . Поэтому дальнейшее повышение температуры (выше θ_D) не может уже вызвать появление новых нормальных колебаний.

3.1.1. Теплоемкость

Элементарное количество теплоты dQ , сообщаемое телу для изменения его температуры от T до $T + dT$, определяется формулой (3.8), где C характеризует вещество, из которого сделано твердое тело, и называется теплоемкостью тела:

$$dQ = C dT . \quad (3.8)$$

Из (3.8) следует, что

$$C = \frac{dQ}{dT} , \quad (3.9)$$

то есть *теплоемкость* есть величина, равная количеству теплоты, которое необходимо сообщить телу, чтобы повысить его температуру на 1°K. Теплоемкость зависит от массы тела, его химического состава и термодинамического состояния.

Различают удельную и молярную теплоемкости. Удельной теплоемкостью c называется теплоемкость единицы массы вещества. Если тело однородно, то $c = C/m$, где m – масса тела. Теплоемкость одного моля вещества называют молярной или молекулярной теплоемкостью и обозначают C .

Между молярной и удельной теплоемкостями существует простая связь:

$$c = C/\mu, \quad (3.10)$$

где μ – молярная масса вещества.

С физической точки зрения различают два типа теплоемкости: при постоянном объеме и при постоянном давлении. Теплоемкостью при постоянном объеме V называют теплоемкость (удельную c_V и молярную C_V), которую определяют при нагревании тела при постоянном объеме. Теплоемкость при постоянном давлении P называют теплоемкость (удельную c_P и молярную C_P), которую определяют при нагревании тела при постоянном давлении.

Согласно классическим представлениям, кристалл, состоящий из N атомов, является системой с $3N$ колебательными степенями свободы, на каждую из которых приходится в среднем одинаковая энергия, равная kT . Внутренняя энергия одного моля твердого тела, следовательно, равна:

$$U = 3kT N_A = 3R, \quad (3.11)$$

где k – постоянная Больцмана; N_A – число Авогадро; R – универсальная газовая постоянная, $R = kN_A$). Отсюда для молярной теплоемкости твердого тела получаем

$$C = dU/dT = 3R. \quad (3.12)$$

Действительно, опытным путем было установлено, что теплоемкость всех твердых тел не зависит от температуры. Это утверждение носит название *закона Дюлонга и Пти*.

Дальнейшие исследования показали, что теплоемкость твердых тел не зависит от температуры только в области высоких температур (T/θ_D) и уменьшается с понижением температуры (рис. 3.1).

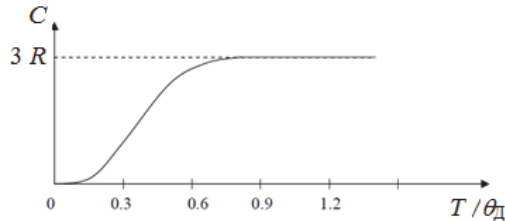


Рис. 3.1. Температурная зависимость теплоемкости твердых тел

Квантовая теория теплоемкости кристаллических тел была создана Эйнштейном и Дебаем. Основные положения теории базировались на модели твердого тела, по которой решетка из N атомов отождествлялась с системой N независимых гармонических квантовых осцилляторов, колеблющихся с одинаковой частотой, по Эйнштейну, и зависимых квантовых осцилляторов, колеблющихся с разными частотами, – по Дебаю.

Теплоемкость одного моля кристалла по Дебаю:

$$C_v = 3R \left[12 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \frac{\theta_D}{T} \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx - \frac{3(\theta_D/T)}{e^{\theta_D/T} - 1} \right], \quad (3.13)$$

где θ_D – характеристическая температура Дебая.

Основным вопросом теории теплоемкости является зависимость $C_T(T)$.

В области низких температур ($T \ll \theta_D$), согласно закону Дебая, теплоемкость решетки изменяется пропорционально кубу температуры:

$$C_v = \frac{12\pi^4}{5} R \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 : T^3 . \quad (3.14)$$

В области температур ($T \gg \theta_D$): $C_v = 3R$.

Между областями низких и высоких температур лежит достаточно широкая область средних температур, в которой происходит постепенный переход от закона Дебая к закону Дюлонга и Пти. Это наиболее сложная для анализа область температур, в которой теплоемкость рассчитывается по формуле (3.13).

В модели Эйнштейна кристалл представляется совокупностью независимых идентичных квантовых осцилляторов с одинаковой частотой ω_0 .

Средняя тепловая энергия одного моля вещества в модели Эйнштейна с учетом трех возможных поляризаций:

$$\langle W \rangle = 3N_A \hbar \omega_0 \langle n_\omega \rangle = 3N_A \hbar \omega_0 \left[\exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right) - 1 \right]^{-1} . \quad (3.15)$$

Решеточная молярная теплоемкость

$$C = \frac{\partial \langle W \rangle}{\partial T} = 3R \left(\frac{\hbar \omega_0}{kT} \right)^2 \exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right) - 1 \right]^{-2} . \quad (3.16)$$

При низких температурах $kT \ll \hbar \omega_0$ выражения (3.15) и (3.16) принимают вид:

$$\langle W \rangle = 3N_A \hbar \omega_0 \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right), \quad (3.17)$$

$$C = 3R \left(\frac{\hbar \omega_0}{kT} \right)^2 \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right). \quad (3.18)$$

При высоких температурах $kT \gg \hbar \omega_0$, когда возбуждены все три ветви оптических фононов, получаем

$$\langle W \rangle = 3RT , \quad (3.19)$$

$$C = 3R . \quad (3.20)$$

Таким образом, теплоемкость при низких температурах, в рамках модели Эйнштейна, имеет экспоненциальную зависимость от температуры в отличие от степенной зависимости ($\sim T^3$) согласно закону Дебая.

В пределах высоких температур модели Эйнштейна и закон Дебая дают одинаковые значения теплоемкости.

3.1.2. Теплопроводность

В реальных кристаллах при не слишком низких температурах колебания атомов носят ангармонический характер. Появление ангармоничности приводит к тому, что нормальные колебания решетки перестают быть независимыми и при встречах взаимодействуют друг с другом, обмениваясь своей энергией и меняя направление своего распространения. Вследствие протекания таких процессов становится возможной передача энергии от колебания одной частоты к колебаниям другой частоты и установление в кристалле теплового равновесия.

Теплопроводность характеризует способность вещества переносить тепловую энергию.

Количественная оценка этой способности называется коэффициентом теплопроводности (χ).

Физическая природа теплопроводности состоит в том, что молекулы тела (или его части) с более высокой температурой обладают большей кинетической энергией и передают ее соседним молекулам другого тела, обладающим меньшей кинетической энергией и, следовательно, меньшей температурой.

В соответствии с теорией явлений переноса в обычных газах коэффициент теплопроводности равен:

$$\chi = \frac{1}{3} v < \lambda_{\Phi} > C_V , \quad (3.21)$$

где v – скорость фононов; $< \lambda_{\Phi} >$ – длина свободного пробега фононов; C_V – теплоемкость фононного газа единицы объема кристалла.

В области высоких температур $n_{\Phi} \sim T$ (n_{Φ} – концентрация фононов).

При температурах ниже дебаевской температуры концентрация фононов резко уменьшается при понижении температуры, вследствие

чего их длина свободного пробега резко возрастает и при $T < \theta_D/20$ достигает величины, сравнимой с размерами кристалла.

Поскольку стенки кристалла плохо отражают фононы, то дальнейшее понижение температуры не приводит к увеличению $\langle \lambda_{\Phi} \rangle$, так как последняя определяется просто размерами кристалла. Температурная зависимость теплопроводности решетки в этом диапазоне температур определяется зависимостью от T теплоемкости кристалла C_V . Так как в области низких температур $C_V \sim T^3$, то и $\chi_{\text{реш}} \sim T^3$.

Качественная зависимость решеточной теплопроводности от температуры приведена на рис. 3.2. В области низких температур $\chi_{\text{реш}} \sim T^3$. По мере увеличения температуры растет концентрация фононов, что должно приводить к росту $\chi_{\text{реш}}$.

Однако повышение концентрации фононов сопровождается усилением интенсивности фонон-фононного рассеяния и уменьшением $\langle \lambda_{\Phi} \rangle$, что должно приводить к падению $\chi_{\text{реш}}$. В области высоких температур это падение происходит обратно пропорционально T ($\chi_{\text{реш}} \sim 1/T$).

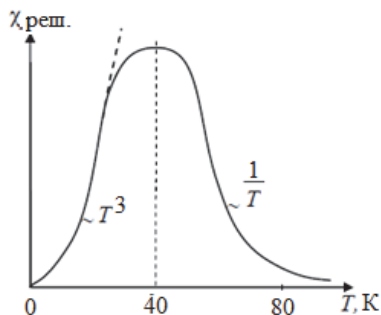


Рис. 3.2. Зависимость решеточной теплопроводности от температуры

3.2. Примеры решения задач

Задача 1

Получите аналитическое выражение закона дисперсии фононов для простейшей модели одномерного кристалла: цепочки длиной L , составленной из периодических (с периодом a) расположенных атомов массой M , связанных упругими пружинками с коэффициентом жесткости β .

Решение

Для определения закона дисперсии фононов $\omega(k)$, связанного со скоростью их движения $d\omega/dk$, следует рассматривать динамику распространения возмущений, так же, как скорость звука в сплошных средах, вычисляется на основе динамики распространения деформаций в этих средах.

На рис. 3.3 представлена модель одномерного кристалла.

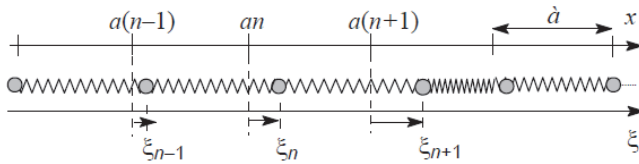


Рис. 3.3. Модель одномерного кристалла.

Штрихами на верхней и нижней осях показаны положения атомов решетки в недеформированном и деформированном (возбужденном) состояниях, соответственно. ξ_n — смещение n -го атома из положения равновесия $x_n = an$

Запишем уравнение движения для n -го атома, учитывая действие на него в первом приближении только ближайших соседей:

$$M\xi_n = \beta(\xi_{n+1} - \xi_n) - \beta(\xi_n - \xi_{n-1}),$$

или

$$M\xi_n = \beta\Sigma(\xi_{n-1} - \xi_n). \quad (3.22)$$

Будем искать решение в виде бегущей волны, то есть для n -го атома при $x_n = an$:

$$\xi_n = Ae^{i(\omega t + qna)}. \quad (3.23)$$

Выражение для ξ_n удовлетворяет условию цикличности

$$\xi(x) = \xi(x+L), \quad (3.24)$$

если волновой вектор принимает дискретный набор значений

$$k_i = \frac{2\pi}{Na} i = \frac{2\pi}{\lambda} i \quad \left(i = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{2} \right), \quad (3.25)$$

который совпадает с набором волновых чисел, описывающих всевозможные возбуждения в одномерном кристалле.

Подставляя (3.23) в (3.25) получаем частоты колебаний атомов:

$$\omega = \pm 2\sqrt{\frac{\beta}{M}} \sin \frac{ka}{2} = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}} \sin \frac{\pm ka}{2} = \omega_{\max} \sin \frac{\pm ka}{2}, \quad (3.26)$$

где $\omega_{\max} = 2\sqrt{\beta/M}$.

Значение частоты колебаний атома не зависит от его порядкового номера, а, следовательно, все атомы колеблются с одной и той же частотой и амплитудой, что соответствует распространению бегущих волн. Поскольку частота не может быть отрицательной, то знак « \pm » перенесен к волновому вектору и соответствует двум волнам, распространяющимся в противоположных направлениях. Зависимость $\omega(k)$ выражает закон дисперсии акустической ветви продольных фононов (рис. 3.4).

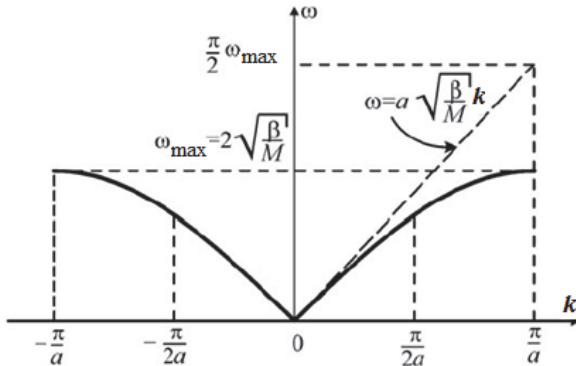


Рис.3.4. Закон дисперсии $\omega(k)$ акустической ветви продольных фононов для одномерной цепочки атомов (сплошная кривая) и линейный закон дисперсии звуковых волн в непрерывной среде (штриховая прямая)

При низкочастотных колебаниях ($\lambda \gg a$) закон дисперсии можно линеаризовать, разлагая в ряд Тейлора по k до первого порядка, что дает линейную зависимость ω от k

$$\omega \approx \left(a \sqrt{\frac{\beta}{M}} \right) k, \quad (3.27)$$

характерную для звуковых волн, распространяющихся в непрерывной упругой среде.

Таким образом, при $\lambda \gg a$ цепочка ведет себя как непрерывная упругая нить, в которой звуковые волны распространяются со скоростью

$$V = a \sqrt{\frac{\beta}{M}}.$$

Ответ: аналитическое выражение закона дисперсии фононов для простейшей модели одномерного кристалла имеет следующий вид:

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{\beta}{M}} \sin \frac{\pm ka}{2} = \omega_{\max} \sin \frac{\pm ka}{2}.$$

Задача 2

Оценить температуру Дебая для железа, полагая скорости распространения продольных и поперечных волн одинаковыми и равными $V_s = 5$ км/с. Плотность железа $\rho = 7,8$ г/см³.

Решение

Температура Дебая по определению связана с максимальной частотой фононов следующим выражением:

$$k\theta_D = \hbar\omega_D,$$

где k – постоянная Больцмана; ω_D – характеристическая дебаевская частота.

Максимальное значение волнового вектора определяется концентрацией атомов $n = \frac{N}{V} = \frac{\rho}{m} = \frac{\rho N_A}{\mu}$, где m – масса одного атома железа;

μ – молярная масса железа; ρ – плотность железа. Учитывая (3.6),

$$k_{\max} = \left[6\pi^2 n \right]^{1/3} = \left[6\pi^2 \frac{\rho N_A}{\mu} \right]^{1/3}.$$

Используя линейный закон дисперсии $\omega = V_k$, получаем выражение для оценки температуры Дебая:

$$\theta_D = \frac{\hbar}{k} V_s k_{\max} = \frac{\hbar}{k} V_s \left[6\pi^2 n \right]^{1/3} = \frac{\hbar}{k} V_s \left[6\pi^2 \frac{\rho N_A}{\mu} \right]^{1/3}.$$

Подставляя числовые данные, получаем

$$\theta_D = \frac{\hbar}{k} V_s \left[6\pi^2 \frac{\rho N_A}{\mu} \right]^{1/3} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{1,38 \cdot 10^{-23}} 5 \cdot 10^3 \left[6\pi^2 \frac{7,8 \cdot 10^3 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}}{55,8 \cdot 10^{-3}} \right]^{1/3} \approx 619 \text{ K}$$

Задача 3

Определить скорость звука в алмазе, зная, что дебаевская температура алмаза равна 1860°K и $d = 1,54 \text{ \AA}$.

Решение

Температура Дебая связана с максимальной частотой фононов следующим выражением:

$$k\theta_D = \hbar\omega_D.$$

Тепловые фононы или дебаевские кванты упругой энергии, каждый из которых представляет собой упругую плоскую гармоническую волну с энергией $\hbar\omega$, имеют огромный спектр частот. Самые низкие частоты фононов или соответственно наибольшие длины упругих волн определяются размерами образца, а наивысшие частоты, то есть наименьшие длины волн, — расстоянием между соседними атомами, d . Самая малая длина волны колебаний кристалла $\lambda_{\min} = 2d$.

$$\text{Длина волны, соответствующая } \omega_{\max}, \text{ равна } \lambda_m = \frac{2\pi v}{\omega_m} = (12\pi v)^{1/3},$$

то есть примерно расстоянию между частицами.

Следовательно, для температуры Дебая справедлива следующая оценка:

$$\theta_{\text{Д}} = \frac{\hbar \omega_{\text{max}}}{k} = \frac{\hbar V_{\text{max}}}{k} = \frac{\hbar V_{\text{зв}}}{\lambda_{\text{min}} k} = \frac{\hbar V_{\text{зв}}}{2dk}.$$

Таким образом, для скорости звука получаем

$$V_{\text{зв}} = \frac{2d\theta_{\text{Д}}k}{n}.$$

Подставляя числовые данные, имеем

$$V_{\text{зв}} = \frac{2 \cdot 1,54 \cdot 10^{-10} \cdot 1860 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}}{6,63 \cdot 10^{-34}} = 11,92 \cdot 10^3 \text{ (м/с)}.$$

Задача 4

Длина волны L фонона, соответствующего частоте $\omega = 0,01 \omega_{\text{max}}$, равна 52 нм. Пренебрегая дисперсией звуковых волн, определить характеристическую температуру Дебая, если усредненная скорость звука в кристалле равна 4,8 км/с.

Решение

Длина волны связана с частотой следующим выражением:

$$\lambda_m = \frac{2\pi v}{\omega_m}.$$

По условию $\omega = 0,01 \omega_{\text{max}}$, тогда получаем $\lambda_m = \frac{2\pi v}{0,01 \omega_{\text{max}}}.$

Температура Дебая по определению связана с максимальной частотой следующим выражением:

$$k\theta_{\text{Д}} = \hbar \omega_{\text{max}}.$$

Выразив максимальную частоту, получим

$$\omega_{\text{max}} = \frac{\theta_{\text{Д}} k}{\hbar}.$$

Подставив все в выражение для длины волны, получаем, что

$$\lambda = \frac{2\pi \hbar}{0,01 \theta_{\text{Д}} k}.$$

Отсюда

$$\theta_D = \frac{2\pi 9h}{0,01 \lambda k}.$$

Подставляя числовые данные, получаем

$$\theta_D = \frac{2\pi 9h}{0,01 \lambda k} = \frac{2 \cdot 3,14 \cdot 4,8 \cdot 10^3 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34}}{0,01 \cdot 52 \cdot 10^{-9} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}} = 441 \text{ (K)}.$$

Задача 5

Характеристическая температура золота 170 °К. Определить постоянную квазиупругой силы.

Решение

Представляя атом золота гармоническим осциллятором определенной частоты, можно считать, что электрон в атоме удерживается в положении равновесия квазиупругой силой

$$F = -\gamma r,$$

Масса электрона и постоянная квазиупругой силы γ определяют частоту собственных колебаний гармонического осциллятора ϑ .

В приближении теории Эйнштейна температура связана с собственной частотой выражением

$$\theta_E = \frac{h\omega_0}{k} = \frac{h\vartheta}{k},$$

где ϑ – собственная частота колебаний атомов.

В свою очередь, собственная частота колебаний атомов связана с постоянной квазиупругой силы следующим образом

$$\vartheta = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\gamma}{m}}.$$

Принимая во внимание предыдущие выражения, имеем

$$\theta_E = \frac{h}{2\pi k} \sqrt{\frac{\gamma}{m}}$$

и тогда постоянная квазиупругой силы

$$\gamma = \frac{\theta_E^2 m (2\pi k)^2}{h^2} = \frac{4\pi^2 k^2 \theta_E^2 m}{h^2}.$$

Подставляя числовые данные, получаем

$$\gamma = \frac{4\pi^2 k^2 \theta_E^2 m}{h^2} = \frac{4 \cdot 3,14^2 \cdot (1,38 \cdot 10^{-23})^2 \cdot 170^2 (197 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27})}{(6,63 \cdot 10^{-34})^2} \approx 160 \text{ (кг/с}^2\text{)}.$$

Задача 6

Определить количество теплоты ΔQ , необходимое для нагревания кристалла NaCl массой $m = 20$ г на $\Delta T = 2$ °К, в двух случаях, если нагревание происходит от температуры: 1) $T_1 = \theta_D$; 2) $T_2 = 2$ °К. Характеристическую температуру Дебая θ_D для NaCl принять равной 320 °К.

Решение

Количество теплоты, подводимое для нагревания тела от температуры T_1 до температуры T_2 , может быть вычислено по формуле:

$$\Delta Q = \int_{T_1}^{T_2} c dT,$$

где c – удельная теплоемкость тела.

Удельная теплоемкость тела связана с молярной теплоемкостью C соотношением:

$$c = \left(\frac{m}{\mu} \right) C,$$

где μ – молярная масса; m – масса тела.

С учетом последнего выражения получим

$$\Delta Q = \left(\frac{m}{\mu} \right) \int_{T_1}^{T_2} C dT.$$

В общем случае C – это функция температуры, поэтому за знак интеграла ее выносить нельзя. Однако в первом случае изменением теплоемкости по сравнению с ее значением при температуре T_1 можно пре-

небредь и считать ее на всем интервале температур ΔT постоянной и равной $C(T_1)$, и тогда формула примет вид

$$\Delta Q = (m/\mu) C(T_1) \Delta T.$$

Молярная теплоемкость в теории Дебая выражается формулой

$$C_V = 3R \left[12 \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3}{e^x - 1} - \frac{3(\theta_D/T)}{e^{\theta_D/T} - 1} \right].$$

В первом случае при $T_1 = \theta_D$ интеграл:

$$\int_0^{\theta_D/T_1} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \int_0^1 \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = 0,225.$$

И следовательно, $C = 2,87 R$. Подставляя это значение в выражение для ΔQ , получим $\Delta Q = 2,87(m/\mu) R \Delta T$.

Произведя вычисления, получаем $\Delta Q = 16,3$ Дж.

Во втором случае $T \ll \theta_D$, нахождение ΔQ облегчается тем, что можно воспользоваться предельным законом Дебая, согласно которому теплоемкость пропорциональна третьей степени температуры. В этом случае теплоемкость сильно изменяется в пределах заданного интервала температур и ее нельзя выносить за знак интеграла.

Используя выражение предельного закона Дебая,

$$C = \frac{12\pi^4}{5} \frac{m}{\mu} R \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3,$$

получим

$$\Delta Q = \frac{12\pi^4}{5} \frac{m}{\mu} \frac{R}{\theta_D^3} \int_{T_2}^{T_2 + \Delta T} T^3 dT.$$

Выполним интегрирование:

$$\Delta Q = \frac{12\pi^4}{5} \frac{m}{\mu} \frac{R}{\theta_D^3} \left[\frac{(T_2 + \Delta T)^4}{4} - \frac{T_2^4}{4} \right].$$

С учетом того, что $T_2 + \Delta T = 2 T_2$, получаем

$$\Delta Q = \frac{3\pi^4}{5} \frac{m}{\mu} \frac{R}{\theta_D^3} 15 T_2^4 ,$$

или

$$\Delta Q = 9\pi^4 \frac{m}{\mu} R \frac{T_2^4}{\theta_D^3} .$$

Произведя вычисления, получим

$$\Delta Q = 9\pi^4 \frac{m}{\mu} R \frac{T_2^4}{\theta_D^3} = 9\pi^4 \frac{20 \cdot 10^{-3}}{58 \cdot 10^{-3}} \cdot 8,31 \frac{2^4}{320^3} = 1,22 \text{ мДж} .$$

Задача 7

Определить величину квазиимпульса фонона, соответствующего частоте $\omega = 0,1\omega_{\max}$. Усредненное значение скорости звука в кристалле $\langle V \rangle = 1380$ м/с. Характеристическая температура Дебая 100 °К. Дисперсией звуковых волн в кристалле пренебречь.

Решение

Квазиимпульс фонона определяется следующим образом:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} .$$

При отсутствии дисперсии звуковых волн волновое число определяется как

$$k = \frac{\omega}{\langle V \rangle} .$$

Таким образом, для квазиимпульса получим

$$p = \frac{\hbar \omega}{\langle V \rangle} = \frac{\hbar 0,1\omega_{\max}}{\langle V \rangle} .$$

Учитывая выражение, определяющее связь между температурой Дебая и максимальной частотой,

$$k\theta_D = \hbar\omega_{\max}$$

для квазиимпульса получаем следующее выражение:

$$p = \frac{\hbar 0,1\omega_{\max}}{\langle V \rangle} = \frac{\hbar 0,1k \left(\frac{\theta_{\text{д}}}{\hbar} \right)}{\langle V \rangle} = \frac{0,1k\theta_{\text{д}}}{\langle V \rangle}.$$

Подставив числовые значения и произведя вычисления, получим

$$p = \frac{0,1k\theta_{\text{д}}}{\langle V \rangle} = \frac{0,1 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 100}{1380} = 10^{-25} \quad (\text{кг} \cdot \text{м/с}).$$

Задача 8

Период решетки одномерного кристалла $a = 0,3$ нм. Атомы одномерного кристалла образуют не взаимодействующие цепи. Определить максимальную энергию фононов, распространяющихся вдоль этой цепочки атомов. Скорость звука в кристалле принять равной 5 км/с.

Решение

Энергия фонона равна: $E = \hbar\omega$.

Частоту можно выразить через скорость фонона и его волновое число как

$$\omega = V k.$$

Подставив в выражение для энергии фонона, получим следующее:

$$E = \hbar V k = \frac{2\pi \hbar V}{\lambda}.$$

Энергия будет максимальной при минимально возможном значении длины волны фонона λ . Для одномерной атомной цепочки $\lambda_{\min} = 2a$.

С учетом этого замечания формула для максимальной энергии примет следующий вид:

$$E = \frac{2\pi \hbar V}{2a}.$$

После подстановки получаем следующий результат:

$$E = \frac{2\pi \hbar V}{2a} = \frac{2 \cdot 3,14 \cdot 1,05 \cdot 10^{-34} \cdot 5 \cdot 10^3}{2 \cdot 10^{-10}} = 5,5 \cdot 10^{-21} \quad (\text{Дж}).$$

Задача 9

Определите отношение импульса фотона с энергией 5 МэВ к средне-
квадратичному импульсу атомов аргона при температуре 420 °К.

Решение

Обозначим: p_{Φ} – импульс фотона; p_{Ar} – импульс аргона. Молярная
масса Аргона $\mu(\text{Ar}) = 40 \cdot 10^{-3}$ кг/моль.

Запишем выражения, связывающие импульс фотона с его энерги-
ей и импульс Аргона со среднеквадратичной скоростью:

$$p_{\Phi} = \frac{h}{\lambda},$$

$$\lambda = \frac{hc}{E_{\Phi}},$$

$$p_{\Phi} = \frac{hc}{E_{\Phi}}$$

$$p_{\text{Ar}} = mV_{\text{кв}} = \sqrt{3kTm}.$$

Массу найдем как

$$m = \frac{\mu}{N_A}.$$

Запишем отношение импульса фотона к среднеквадратичному
импульсу Аргона:

$$\frac{p_{\Phi}}{p_{\text{Ar}}} = \frac{E_{\Phi}}{c\sqrt{3kTm}}.$$

Выполнив вычисления, получаем

$$\frac{p_{\Phi}}{p_{\text{Ar}}} = \frac{E_{\Phi}}{c\sqrt{3kTm}} = \frac{5 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{3 \cdot 10^8 \cdot \sqrt{3 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 420 \cdot 6,64 \cdot 10^{-26}}} = 784.$$

Задача 10

Определите число фотонов с частотой, заключенных в интервале 641 ТГц до 648 ТГц в объеме 330 см³ при температуре $T = 302$ °К.

Решение

Число квантовых состояний излучения в объеме V найдем по формуле

$$dq = 2 \frac{4\pi P^2 dP}{h^3} V.$$

Так как $P = \frac{E}{c}$, то $dq = 2 \frac{8\pi E^2 dE}{h^3 c^3} V$

Минимальная энергия фотонов – $E = h\nu$.

Согласно функции распределения Бозе – Эйнштейна,

$$f_E(\nu) = \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1}.$$

Число фотонов найдем как

$$dN = dq \cdot f_E(\nu),$$

$$dN = \frac{dq}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} = \frac{8\pi\nu_{\text{cp}}^2 \Delta\nu \cdot V}{c^3 \left[\exp\left(\frac{h\nu_{\text{cp}}}{kT}\right) - 1 \right]}$$

$$\nu_{\text{cp}} = \frac{\nu_1 + \nu_2}{2} = \frac{641 + 648}{2} = 644,5 \text{ (ТГц)}$$

$$\Delta\nu = \nu_2 - \nu_1 = 648 - 641 = 7 \text{ (ТГц)}$$

Произведем вычисления:

$$dN = \frac{8 \cdot 3,14 \cdot (644,5 \cdot 10^{12})^2 \cdot 7 \cdot 10^{12} \cdot 330 \cdot 10^{-6}}{(3 \cdot 10^8)^3 \left[\exp\left(\frac{6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 644,5 \cdot 10^{12}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 302}\right) - 1 \right]} = 0,31 \cdot 10^{-29}.$$

Контрольные вопросы

1. Какие колебания кристаллической решетки играют основную роль в определении тепловых свойств кристаллов?
2. Что такое фонон?
3. Какая функция распределения применяется для описания поведения фононов?
4. Что такое дебаевская частота?
5. Что характеризует температура Дебая?
6. Что определяет теплоемкость твердого тела?
7. Дайте определение удельной и молярной теплоемкости и как эти понятия связаны между собой?
8. Опишите теплоемкость при постоянном объеме и постоянном давлении.
9. Как зависит теплоемкость от температуры?
10. Назовите основные положения теории теплоемкости.
11. В чем заключается явление теплопроводности?
12. Как зависит теплопроводность от температуры?

Список литературы

1. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел / Ч. Киттель. – Гл. 2,3. М.: Наука, 1967.
2. Кубо Р. Статистическая механика / Р. Кубо. М.: Мир, 1967.
3. Лифшиц Е.М. Физическая кинетика / Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. – Гл. 7,9. М.: Наука, 1979.
4. Займан Дж. Принципы теории твердого тела / Дж. Займан. – Гл. 2–6. М.: Мир, 1974.
5. Харрисон У. Теория твердого тел / У. Харрисон. – Гл. 4. М.: Мир, 1972.
6. Ашкрофт Н. Физика твердого тела / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. – Т. 2., Гл. 22–26. М.: Мир, 1979.

4. ЗОННАЯ ТЕОРИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

4.1. Теоретические сведения

Любые свойства кристалла определяются характером взаимодействия всех его частиц, находящихся в непрерывном сложном движении. Состояние любой квантовой частицы можно определить, решая соответствующее *уравнение Шредингера*. В случае взаимодействия всех составляющих кристалл частиц такая задача неразрешима. Она упрощается тем, что при описании ряда свойств кристалла нужно знать только состояние его валентных электронов. Таким образом, задача сводится к рассмотрению движения одного электрона в так называемом самосоглазованном поле кристалла.

Уравнение Шредингера для свободного электрона имеет следующий вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi, \quad (4.1)$$

где m – масса электрона; E – энергия электрона; $\psi(x,y,z,t)$ – волновая функция электрона в кристалле.

Волновая функция электрона связана с волновым вектором как

$$\psi = Ce^{i\vec{k}\vec{r}},$$

где

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}.$$

Волновой вектор можно найти через энергию электрона:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (4.2)$$

Изолированный атом представляет собой потенциальную яму, в которой электрон может занимать одно из ряда дискретных энергетических состояний. Зависимость потенциальной энергии U электрона от расстояния r до ядра показана на рис. 4.1 сплошной линией.

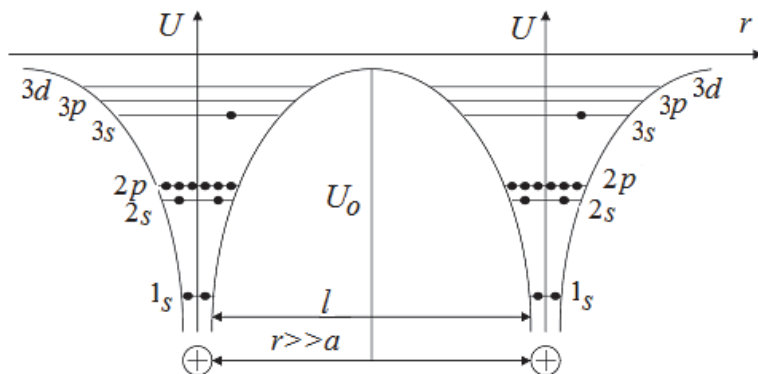


Рис. 4.1. Энергетическая схема для изолированного атома натрия

Изолированные атомы отделены друг от друга *потенциальными барьерами* шириной $l \gg a$, где a – постоянная кристаллической решетки. Потенциальный барьер препятствует свободному переходу электронов от одного атома к другому. В изолированном атоме электрон в основном состоянии может находиться сколь угодно долго, и поэтому ширина энергетического уровня ΔE сколь угодно мала. В возбужденном состоянии электрон находится в течение времени $\Delta t = 10^{-8}$ с.

Переход электрона от атома к атому происходит без изменения его энергии. Это соответствует состоянию полного обобществления валентных электронов в решетке. Такие обобществленные *электроны* называют обычно *свободными*, а их совокупность – *электронным газом*.

При образовании кристалла происходит не только уменьшение высоты и ширины потенциального барьера, но и качественное изменение энергетических уровней электронов.

Расщеплению в зоны подвержены не только энергетические уровни валентных электронов, а все без исключения уровни, как занятые электронами (нижние энергетические уровни), так и свободные от них (верхние уровни). Таким образом, вместо системы дискретных энергетических уровней, которыми характеризуется отдельный атом, в кристалле появляется система энергетических зон.

Величина расщепления для разных уровней не одинакова. Сильнее видоизменяются уровни, заполненные в атоме валентными электронами. Степень расщепления зависит от расстояния между атомами.

Ширина энергетической зоны не зависит от размеров кристалла, а определяется природой образующих кристалл атомов и строением кристалла.

Ширина энергетической зоны различна в разных направлениях, поскольку различны в этих направлениях межатомные расстояния.

Энергетическая зона не является рядом непрерывных значений энергии, а представляет собой систему дискретных энергетических уровней. Число уровней в энергетической зоне равно произведению числа атомов в кристалле на число электронов, которые могут находиться на уровне с соблюдением принципа Паули. Таким образом, зона, возникшая из одного уровня изолированного атома, состоит из N подуровней ($N = 10^{23} - 10^{24}$).

Каждая зона содержит ограниченное число энергетических уровней, вследствие чего может вместить ограниченное число электронов. Следуя принципу Паули, на каждом уровне может находиться $2(2l + 1)$ электронов (l – орбитальное квантовое число), а в зоне, следовательно, $2N(2l + 1)$ электронов. На рис.4.2 показано заполнение энергетических зон электронами на примере кристалла натрия. Так, энергетическая зона $1s$, содержащая $2N$ электронов; $2s$ – зона, содержащая $2N$ электронов; $2p$ – зона, содержащая $6N$ электронов, полностью укомплектованы. $3s$ – зона заполнена электронами только наполовину (в ней N электронов займут $N/2$ нижних подуровней). $3p$ – зона и все вышележащие зоны свободны от электронов. Принято называть зону, заполненную валентными электронами, валентной зоной, а следующую за ней, свободную от электронов – зоной проводимости.

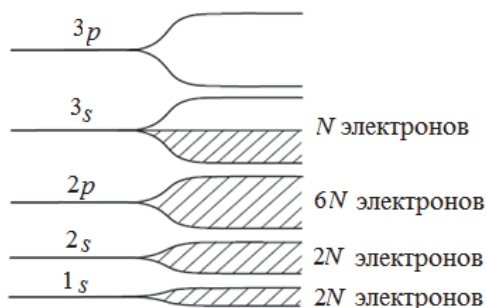


Рис. 4.2. Заполнение энергетических зон электронами для кристалла натрия

Поскольку нижние энергетические уровни полностью заполнены электронами, так что движение электронов по энергетическим подуровням зон невозможно (нет вакантных мест), то свойства твердых тел будут определяться только электронами валентной зоны.

С точки зрения зонной теории различие электрических свойств твердых тел определяется двумя причинами:

- 1) характером расположения энергетических зон;
- 2) степенью заполнения зон электронами.

Схематическое изображение зонной структуры металлов, полупроводников и диэлектриков представлено на рис. 4.3 – 4.4. Нижняя заштрихованная полоса содержит уровни энергии валентных электронов, связанных с кристаллической решеткой твердого тела, и называется валентной зоной. Верхняя полоса называется зоной проводимости, она содержит различные возможные значения энергии электронных уровней или электронов проводимости, обуславливающих проводимость.

Энергетический зазор, в котором отсутствуют электронные уровни, между абсолютным максимумом валентной зоны и абсолютным минимумом зоны проводимости составляет ширину запрещенной зоны и равен той минимальной энергии, которую достаточно сообщить валентному электрону, чтобы «освободить» его из валентной зоны и превратить в электрон проводимости.

Деление веществ на проводники, полупроводники и диэлектрики зонная теория объясняет, прежде всего, степенью заполнения электронами валентной зоны. Если валентная зона кристалла заполнена не полностью, то кристалл является проводником (рис. 4.3, *а*). Между тем, проводником может оказаться и такой кристалл, валентная зона которого заполнена полностью, но зона проводимости перекрывает валентную зону (рис. 4.3, *б*).

Если в кристалле при температуре $T = 0^\circ\text{K}$ валентная зона полностью занята электронами и отделена от зоны проводимости запрещенной зоной, ширина которой $\leq 1 \text{ эВ}$, то кристалл относится к полупроводникам (рис. 4.4, *а*). Если же ширина запрещенной зоны по порядку величины больше 1 эВ , то вещество относится к диэлектрикам (рис. 4.4, *б*).

Подобно тому, как в изолированном атоме электроны могут совершать переходы между энергетическими уровнями, электроны в кристалле могут переходить из одной зоны в другую (при наличии вакантных мест), а также совершать переходы с одного уровня на другой

внутри самой зоны. Для перевода электрона с одного уровня на другой внутри зоны требуется энергия порядка 10^{-23} эВ.

Вследствие этого при $T = 0^\circ\text{K}$ полупроводники практически не проводят электрический ток.

При температурах выше абсолютного нуля проводимость полупроводника может быть обусловлена переходами электронов между валентной зоной и зоной проводимости. Для этого электрон должен получить энергию, большую, чем ширина запрещенной зоны. Энергия теплового движения при температурах порядка комнатной оказывается уже достаточной для перевода некоторой части электронов из валентной зоны в зону проводимости. Эти электроны будут находиться в условиях, аналогичных тем, в которых находятся валентные электроны в металлах. Одновременно станет возможным переход электронов валентной зоны на ее освободившиеся верхние подуровни. Полупроводник приобретет способность проводить электрический ток.

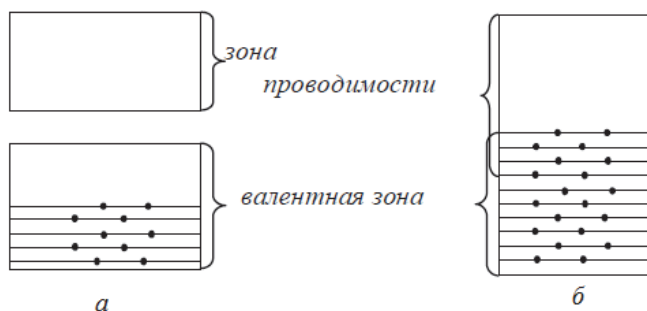


Рис. 4.3. Схематическое изображение зонной структуры металлов

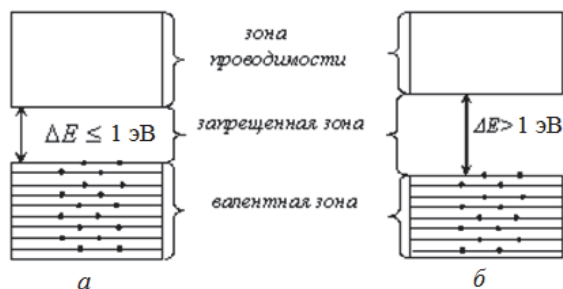


Рис. 4.4. Схематическое изображение зонной структуры полупроводников (а) и диэлектриков (б)

4.2. Примеры решения задач

Задача 1

Получить выражение для эффективной массы электрона в твёрдом теле.

Решение

Рассмотрим движение электрона под действием внешнего электрического поля. Предположим сначала, что мы имеем дело со свободным электроном, помещенным в однородное электрическое поле \vec{E} . Со стороны поля на электрон будет действовать сила $\vec{F} = -e\vec{E}$. Под действием этой силы электрон приобретает ускорение:

$$\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m} = -\frac{e\vec{E}}{m}. \quad (4.3)$$

Здесь m – масса электрона. Вектор ускорения направлен так же, как вектор внешней силы, то есть против поля \vec{E} .

Внешнее поле \vec{E} действует на электрон в кристалле так же, как на свободный электрон, с силой $\vec{F} = -e\vec{E}$, направленной против поля. В случае свободного электрона сила \vec{F} была единственной силой, определяющей характер движения частицы. На электрон, находящийся в кристалле, кроме силы $-e\vec{E}$, действуют значительные внутренние силы, создаваемые периодическим полем решетки. Поэтому движение этого электрона будет более сложным, чем движение свободного электрона.

Движение электрона в кристалле можно описать с помощью волнового пакета. Средняя скорость движения электрона равна групповой скорости волнового пакета:

$$V = \frac{d\omega}{dk}. \quad (4.4)$$

Учитывая, что $\omega = \frac{E}{\hbar}$ для групповой скорости, получаем

$$V = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{dE}{dp}, \quad (4.5)$$

где $p = \hbar k$ – квазиимпульс.

Видим, что средняя скорость электрона в твердом теле определяется законом дисперсии $E(\vec{k})$.

Продифференцируем выражение (4.3) по времени:

$$a = \frac{dV}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt}. \quad (4.6)$$

За время δt электрическое поле \vec{E} совершит работу δA , которая пойдет на приращение энергии электрона $\delta \vec{E}$:

$$\partial E = \partial A = -eE V \partial t. \quad (4.7)$$

Учитывая, что

$$\partial E = \frac{dE}{dk} \partial k = \hbar V \partial k, \quad (4.8)$$

получаем из (4.7)
$$\partial k = -\frac{eE}{\hbar} \partial t \quad (4.9)$$

или
$$\hbar \frac{\partial k}{\partial t} = -eE = F. \quad (4.10)$$

Последнее выражение представляет собой уравнение движения электрона в кристалле. В этом случае произведение $\hbar \left(\frac{dk}{dt} \right)$ равно силе F , действующей на электрон со стороны внешнего электрического поля. Для свободного электрона внешняя сила равна произведению $m \frac{dV}{dt}$.

Подставим теперь $\frac{dk}{dt}$, найденное в (4.10), в выражение для ускорения (4.6):

$$a = -\frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{eE}{\hbar} = -\frac{eE}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}. \quad (4.11)$$

Уравнение (4.11) связывает ускорение электрона a с внешней силой $-e\vec{E}$. Если предположить, что величина $\hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$ имеет смысл

массы, то (4.11) приобретает вид второго закона Ньютона:

$$a = -\frac{eE}{m^*}, \quad (4.12)$$

где

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}. \quad (4.13)$$

Величина m^* получила название *эффективной массы электрона*. Эффективная масса отражает влияние периодического потенциала решетки на движение электрона в кристалле под действием внешней силы.

Из (4.12) следует, что электрон в периодическом поле кристаллической решетки движется под действием внешней силы \vec{F} в среднем так, как двигался бы свободный электрон под действием этой силы, если бы он обладал массой m^* .

Таким образом, если электрону в кристалле вместо массы m приписать эффективную массу m^* , то его можно считать свободным и движение этого электрона описывать так, как описывается движение свободного электрона, помещенного во внешнее поле. Разница m^* и m обусловлена взаимодействием электрона с периодическим полем решетки. При приписывании электрону эффективной массы, это взаимодействие учитывается.

Ответ: выражение для эффективной массы электрона в твёрдом теле имеет следующий вид: $m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$.

Задача 2

В случае анизотропного кристалла энергию как функцию компонент волнового вектора можно представить в виде $E = \alpha_x k_x^2 + \alpha_y k_y^2 + \alpha_z k_z^2$. Найти уравнение движения, соответствующее ньютоновскому уравнению.

Решение

Движение электрона в кристалле под действием силы \vec{F} описывается уравнением:

$$F = m^* \frac{dV}{dt}. \quad (4.14)$$

Учитывая для эффективной массы электрона выражение (4.13), получаем

$$F = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2} \frac{dV}{dt}. \quad (4.15)$$

Или
$$\frac{dV}{dt} = \frac{F}{\hbar^2} \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right). \quad (4.16)$$

Принимая во внимание выражение для энергии как функции компонент волнового вектора, получим

$$\frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{d^2 E}{dk_x^2} + \frac{d^2 E}{dk_y^2} + \frac{d^2 E}{dk_z^2}, \quad (4.17)$$

или
$$E = \alpha_x k_x^2 + \alpha_y k_y^2 + \alpha_z k_z^2. \quad (4.18)$$

Представим каждую из компонент в следующем виде:

$$\frac{dE}{dk_x} = 2\alpha_x k_x, \quad \frac{d^2 E}{dk_x^2} = 2\alpha_x, \quad \frac{d^2 E}{dk_y^2} = 2\alpha_y, \quad \frac{d^2 E}{dk_z^2} = 2\alpha_z. \quad (4.19)$$

Подставив (4.19) в уравнение (4.17), получим

$$\frac{d^2 E}{dk^2} = 2(\alpha_x + \alpha_y + \alpha_z). \quad (4.20)$$

Тогда уравнение движения (4.15) запишем как

$$\frac{dV}{dt} = \frac{2F}{\hbar^2} (\alpha_x + \alpha_y + \alpha_z), \quad (4.21)$$

или

$$F = \frac{\hbar^2}{2(\alpha_x + \alpha_y + \alpha_z)} \left(\frac{dV}{dt} \right). \quad (4.22)$$

Таким образом, уравнение движения, соответствующее ньютоновскому уравнению, имеет следующий вид:

$$F = \frac{\hbar^2}{2(\alpha_x + \alpha_y + \alpha_z)} \left(\frac{dV}{dt} \right).$$

Задача 3

Какое значение эффективной массы следует подставить в выражение, чтобы получить согласие между теоретическим и экспериментальными значениями энергии Ферми $E_F = 3,7$ эВ для лития? Здесь энергия Ферми отсчитывается от дна зоны проводимости. Плотность лития $0,53$ г/см³.

Решение

Выражение для определения значения энергии Ферми при абсолютном нуле температуры имеет следующий вид:

$$E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{2/3},$$

из которого получаем выражение для эффективной массы электрона:

$$m^* = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}}{2E_F(0)}.$$

Концентрацию электронов определим, используя известное выражение

$$n = \frac{\rho}{\mu} N_A.$$

Подставляя числовые значения, определим концентрацию электронов, а затем и эффективную массу:

$$n = \frac{0,53 \cdot 10^6 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}}{6,9} = 4,62 \cdot 10^{28} \text{ (м}^{-3}\text{)}.$$

$$m^* = \frac{(1,05 \cdot 10^{-34})^2 (3(3,14)^2 \cdot 4,62 \cdot 10^{28})^{2/3}}{2 \cdot 3,7 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} = 1,15 \cdot 10^{-30} \text{ (кг)}.$$

Задача 4

Вычислить энергию Ферми, отсчитанную от дна зоны проводимости при температуре $T = 0^\circ\text{K}$ для валентных электронов натрия. Оценить максимальную скорость электронов при $T = 0^\circ\text{K}$. Плотность натрия $0,97 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$.

Решение:

Заполнение энергетических зон электронами для кристалла натрия показано в п.4.1. ($\text{Na}: 1S^2 2S^2 2P^6 3S^1$).

Так, $3s$ – зона заполнена электронами только наполовину (в ней N электронов займут $N/2$ нижних подуровней).

Энергии Ферми при $T = 0^\circ\text{K}$:

$$E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{2/3}.$$

С учетом $n = \frac{\rho}{\mu} N_A$, подставляя числовые значения и выполнив вычисления, получаем

$$n = \frac{0,97 \cdot 10^3 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}}{23 \cdot 10^{-3}} = 2,5 \cdot 10^{28} \text{ (электронов)}.$$

$$E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-34})^2 (3 \cdot \pi^2 \cdot 2,5 \cdot 10^{28})^{2/3}}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}} = 5 \cdot 10^{-19} \text{ (Дж)} = 3,1 \text{ (эВ)}.$$

Максимальную скорость электронов при $T = 0^\circ\text{K}$ можно оценить, используя следующее выражение:

$$\frac{mV_F^2}{2} = E_F(0).$$

Для скорости получим

$$V_F = \sqrt{\frac{2E_F(0)}{m}}$$

Подставляя числовые значения, находим V_F :

$$V_F = \sqrt{\frac{2E_F(0)}{m}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 5 \cdot 10^{-19}}{9,1 \cdot 10^{-31}}} = 330 \cdot 10^6 \text{ (м/с)}$$

Задача 5

Зная распределение электронов в металле по энергиям $dN(E)$, установить распределение электронов по импульсам $dN(p)$. Найти частный случай распределения при $T = 0^\circ\text{K}$.

Решение

Как известно распределение электронов в металле по энергиям $dN(E)$:

$$dN(E) = \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{\sqrt{E} dE}{1 + e^{(E-E_F)/kT}}.$$

При переходе от переменной E к p , имеем:

$$E = \frac{p^2}{2m}; \quad dE = \frac{p}{m} dp;$$

$$dN(p) = \frac{p^2}{\pi^2 \hbar^3} \frac{dp}{1 + e^{\left(\frac{p^2}{2m} - E_F\right)/kT}} = \frac{p}{m} dN(E(p)).$$

При $T = 0^\circ\text{K}$

$$dN(p) = \begin{cases} \frac{p^2}{\pi^2 \hbar^3} dp, & \frac{p^2}{2m} < E_F \\ 0, & \frac{p^2}{2m} > E_F \end{cases}.$$

Таким образом, получаем распределение электронов по импульсам:

$$dN(p) = \frac{p^2}{\pi^2 \hbar^3} \frac{dp}{1 + e^{\left(\frac{p^2}{2m} - E_F\right)/kT}},$$

$$dN(p), T = 0^\circ K = \begin{cases} \frac{p^2}{\pi^2 \hbar^3} dp, & \frac{p^2}{2m} < E_F \\ 0, & \frac{p^2}{2m} > E_F \end{cases},$$

$$dN(p) = \frac{p}{m} dN(E(p)).$$

Задача 6

Зная распределение электронов в металле по импульсам $dN(p)$ установить распределение электронов по скоростям $dN(V)$:

1) при любой температуре; 2) при $T = 0^\circ K$.

Решение

Распределение электронов в металле по импульсам $dN(p)$ имеет вид:

$$dN(p) = \frac{p^2}{\pi^2 \hbar^3} \frac{dp}{1 + e^{\left(\frac{p^2}{2m} - E_F\right)/kT}}.$$

При переходе от переменной p к переменной V , имеем:

$$p = mV; \quad dp = m dV;$$

$$dN(V) = \frac{m^3 V^2}{\pi^2 \hbar^3} \frac{dV}{1 + e^{\left(\frac{mV^2}{2} - E_F\right)/kT}} = m dN(p(V)).$$

При $T = 0^\circ K$:

$$dN(V) = \begin{cases} \frac{m^3 V^2}{\pi^2 \hbar^3} dV, & \frac{mV^2}{2} < E_F \\ 0, & \frac{mV^2}{2} > E_F \end{cases}.$$

Таким образом, получаем распределение электронов по скоростям:

$$dN(V) = \frac{m^3 V^2}{\pi^2 \hbar^3} \frac{dV}{1 + e^{\left(\frac{mV^2}{2} - E_F\right)/kT}} = m dN(p(V)),$$

$$dN(V), \quad T = 0^\circ \text{K} = \begin{cases} \frac{m^3 V^2}{\pi^2 \hbar^3} dV, & \frac{mV^2}{2} < E_F \\ 0, & \frac{mV^2}{2} > E_F \end{cases}.$$

Задача 7

Выразить среднюю квадратичную скорость электронов в металле при $T = 0^\circ \text{K}$ через максимальную скорость электронов. Функцию распределения электронов по скоростям считать известной.

Решение

Распределение электронов по скоростям при $T = 0^\circ \text{K}$ имеет следующий вид:

$$dN(V) = \begin{cases} \frac{m^3 V^2}{\pi^2 \hbar^3} dV, & \frac{mV^2}{2} < E_F \\ 0, & \frac{mV^2}{2} > E_F \end{cases}.$$

Максимально возможную скорость электронов найдем, используя выражения для энергии Ферми при $T = 0^\circ \text{K}$

$$E_F(0) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{2/3}.$$

$$\frac{mV_F^2}{2} = E_F(0).$$

Для скорости получим

$$V_F = \sqrt{\frac{2E_F(0)}{m}}.$$

Распределение по энергиям при $T = 0^\circ\text{K}$ имеет вид:

$$dN(E) = \begin{cases} \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} dE, & E < E_F(0) \\ 0, & E > E_F(0) \end{cases}.$$

Средняя энергия будет равна:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{m \langle V^2 \rangle}{2} = \frac{1}{n} \int_0^{E_F(0)} E \cdot n(E) \cdot dE = \frac{1}{2} \int_0^{E_F(0)} E \cdot \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2 \hbar^3 n} \cdot \sqrt{E} dE = \\ &= \frac{2\sqrt{2m^3}}{5\pi^2 \hbar^3 n} E^{\frac{5}{2}} \Big|_0^{E_F(0)} = \frac{2\sqrt{2m^3}}{5\pi^2 \hbar^3 n} E_{F(0)}^{\frac{5}{2}} = E_F(0) \cdot \frac{2\sqrt{2m^3}}{5\pi^2 \hbar^3 n} E_{F(0)}^{\frac{3}{2}} = \\ &= E_F(0) \cdot \frac{2\sqrt{2m^3}}{5\pi^2 \hbar^3 n} \left(\frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} \right)^{\frac{3}{2}} = \frac{3}{5} E_F(0). \end{aligned}$$

Получаем, что среднеквадратичная скорость равна:

$$\sqrt{\langle V^2 \rangle} = \sqrt{\frac{6E_F(0)}{5m}} = \sqrt{\frac{3}{5}} V_{\max}.$$

Контрольные вопросы

1. Что представляет собой изолированный атом в кристалле?
2. Что такое потенциальный барьер?
3. Что такое электронный газ? Что такое вырождение электронного газа?
4. Что называют энергетическими зонами? Виды энергетических зон.
5. На чем основано и в чем заключается деление веществ на металлы, полупроводники и диэлектрики?
6. Что такое энергетический зазор?
7. От чего зависит ширина энергетической зоны?
8. Как происходит заполнение энергетических зон?
9. Дайте определение и запишите выражение для эффективной массы электрона.

Список литературы

1. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел / Ч. Киттель. – Гл. 9–13. М.: Наука, 1967.
2. Хакен Х. Квантовая теория твердого тела / Х. Хакен. – Гл. 4,5. М.: Наука, 1980.
3. Уэрт Ч. Физика твердого тела / Ч. Уэрт, Р. Томсон. М.: Мир, 1969.
4. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель. М.: Физматгиз, 1978.
5. Давыдов А.С. Теория твердого тела / А.С. Давыдов. М.: Наука, 1976.
6. Ландау Л.Д. Статистическая физика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – Ч.2, Гл.6. М.: Наука, 1978.
7. Джонс Г. Теория зон Бриллюэна и электронные состояния в кристаллах / Г. Джонс. М.: Мир, 1968.

5. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

5.1. Проводимость металлов. Теоретические сведения

Электрические свойства твердых тел определяются их способностью проводить электрический ток, называемой *электропроводностью* (или *проводимостью*).

Количественной характеристикой электропроводности является удельная электропроводность (σ), которая, согласно закону Ома, является коэффициентом пропорциональности между плотностью возникающего тока и величиной электрического поля в среде:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}. \quad (5.1)$$

Величина, обратная удельной электропроводности, характеризующая способность материала препятствовать прохождению электрического тока, называется удельным электросопротивлением (ρ).

Электропроводность различных веществ зависит от концентрации свободных, не связанных с атомами, молекулами или кристаллической структурой электрически заряженных частиц. Чем больше концентрация таких частиц, тем больше электропроводность данного вещества.

Число свободных носителей заряда с увеличением температуры в металлическом проводнике остается неизменным. Между тем вследствие усиления колебаний узлов кристаллической решетки при повышении температуры появляется все больше и больше препятствий на пути направленного движения электронов, то есть уменьшается средняя длина свободного пробега и подвижность электронов снижается. Поэтому при повышении температуры проводимость металлов уменьшается.

В классической и в квантовой теории электрическое сопротивление проводника (металла) объясняется взаимодействием электронов проводимости с кристаллической решеткой.

Пусть в единице объема металла имеется n свободных электронов, средняя скорость которых называется *дрейфовой скоростью* ($V_{др.}$).

По определению

$$\vec{V}_{др} = \frac{1}{n} \sum \vec{V}_i. \quad (5.2)$$

При наложении на металл внешнего электрического поля напряженностью \vec{E} дрейфовая скорость становится отличной от нуля, и в металле возникает электрический ток. Согласно закону Ома, дрейфовая скорость является конечной и пропорциональной величине электрической силы $-e\vec{E}$.

Кроме электрической силы, на электроны проводимости в металле действует сила сопротивления, среднее значение которой

$$\vec{F}_{\text{сопр}} = -r\vec{V}_{\text{др}}, \quad (5.3)$$

где r – коэффициент пропорциональности. Тогда уравнение движения для «среднего» электрона имеет следующий вид:

$$m^* \frac{d\vec{V}_{\text{др}}}{dt} = -e\vec{E} - r\vec{V}_{\text{др}}, \quad (5.4)$$

где m^* – эффективная масса электрона. Это уравнение позволяет найти установившееся значение $\vec{V}_{\text{др}}$.

Найдем закон убывания дрейфовой скорости после выключения внешнего поля. Положив в (5.4) $E = 0$, получим уравнение:

$$m^* \frac{dV_{\text{др}}}{dt} + rV_{\text{др}} = 0. \quad (5.5)$$

Решение уравнения (5.5) методом разделения переменных имеет вид:

$$V_{\text{др}} = V_{\text{др}}(0)e^{-\frac{r}{m^*}t}, \quad (5.6)$$

где $V_{\text{др}}(0)$ – значение дрейфовой скорости в момент выключения поля.

Из (5.6) следует, что за время $\tau = m^*/r$ значение дрейфовой скорости уменьшается в e раз. Величина τ называется *временем релаксации*. Время релаксации есть время между последовательными соударениями электрона с ионами кристаллической решетки, и может быть найдено как

$$\tau = \frac{\lambda}{\langle V \rangle}, \quad (5.7)$$

где λ – средняя длина свободного пробега электронов; $\langle V \rangle$ – средняя скорость теплового движения электронов, определяемая как

$$\langle V \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m^*}}.$$

С учетом (5.4) формула (5.3) может быть записана следующим образом:

$$\vec{F}_{\text{сопр}} = -\frac{m^*}{\tau} \vec{V}_{\text{др}}. \quad (5.8)$$

Установившееся значение дрейфовой скорости можно найти, если приравнять нулю действующую на электрон результирующую силу:

$$-eE - \frac{m^*}{\tau} V_{\text{др}} = 0. \quad (5.9)$$

Тогда

$$V_{\text{др}} = -\frac{eE\tau}{m^*}. \quad (5.10)$$

Установившееся значение плотности тока найдем как

$$j = enV_{\text{др}}, \quad (5.11)$$

где e – заряд электрона; n – концентрация электронов.

Сравнивая полученное выражение (5.11) с законом Ома в дифференциальной форме (5.1), получим

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}. \quad (5.12)$$

В классической теории электропроводности для величины σ имеем следующее выражение:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau_0}{2m}, \quad (5.13)$$

где τ_0 – среднее время свободного пробега электронов: $\tau_0 = \langle \lambda \rangle / \langle V \rangle$, m – масса (не эффективная) электрона. Сравнивая формулы (5.12) и (5.13),

можно сделать вывод, что время релаксации совпадает по порядку величины с временем свободного пробега в металле.

Из (5.10) следует, что скорость дрейфа пропорциональна напряженности электрического поля:

$$V_{\text{д}} = \mu E, \quad (5.14)$$

где коэффициент пропорциональности μ называется подвижностью и равен

$$\mu = \frac{e}{m} \tau. \quad (5.15)$$

Подвижностью носителей заряда называется скорость упорядоченного движения, которую приобретают носители тока в электрическом поле с напряженностью E , равной единице.

В основе квантовой теории электропроводности металлов лежит представление об электронном газе как совокупности не взаимодействующих тождественных квантовых частиц, подчиняющихся статистике Ферми – Дирака (см. п.2).

Расчет, выполненный на основе квантовой механики и статистики Ферми – Дирака, приводит к следующему выражению для удельной электропроводности:

$$\sigma = \frac{ne^2\lambda_F}{m\langle V_F \rangle}, \quad (5.16)$$

здесь n – концентрация электронов проводимости в металле, то есть электронов вблизи уровня Ферми; λ_F – средняя длина свободного пробега электронов с энергией, близкой к энергии Ферми; $\langle V_F \rangle$ – средняя скорость движения электронов вблизи уровня Ферми.

Следует отметить, что в квантовой теории средняя скорость практически не зависит от температуры, так как уровень Ферми с изменением температуры практически не изменяется. Однако с повышением температуры рассеяние электронных волн на колебаниях кристаллической решетки возрастает, что соответствует уменьшению $\lambda_F \sim \frac{1}{T}$. Поэтому удельная электропроводность металлов при повышении температуры уменьшается, а, следовательно, удельное сопротивление увеличивается с ростом T .

5.2. Примеры решения задач

Задача 1

Электропроводность меди $\sigma = 6 \cdot 10^7 \text{ ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$. Определить время релаксации электрона, считая, что каждый атом меди в твердом состоянии отдаёт в зону проводимости один валентный электрон.

Решение

Следуя классической теории, электропроводность меди определяется по формуле

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}.$$

Зная σ , найдем τ :

$$\tau = \frac{m^*\sigma}{ne^2}.$$

Концентрацию электронов можно вычислить, воспользовавшись известной формулой

$$n = \frac{\rho}{\mu} N_A.$$

Подставим в выражение для времени релаксации $\tau = \frac{m_e \sigma \mu}{\rho N_A e^2}$.

Произведя вычисления, получим

$$\tau = \frac{63,5 \cdot 10^{-3} \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 6 \cdot 10^7}{8940 \cdot 6,02 \cdot 10^{23} (1,6 \cdot 10^{-19})^2} = 2,5 \cdot 10^{-14} \text{ (с)}.$$

Задача 2

Вычислить среднюю дрейфовую скорость $V_{\text{др}}$, с которой движется электрон в медном проводнике длиной $l = 1$ м, когда к нему приложена разность потенциалов $U = 10$ В, если удельное сопротивление меди $1,6 \cdot 10^{-8}$ Ом м, а концентрация носителей заряда $n = 10^{28}$ м⁻³.

Решение

Согласно закону Ома в дифференциальной форме (5.1), а также учитывая обратную связь удельной электропроводности и удельного сопротивления, для плотности тока получим следующее выражение:

$$j = \frac{1}{\rho} E.$$

С другой стороны, плотность тока (j) – величина, характеризующая силу тока, протекающего через элемент поверхности площадью S , $j = \frac{1}{S}$ связана с дрейфовой скоростью как

$$j = enV_{\text{др}}.$$

Напряженность электрического поля в проводнике длиной l , к которому приложена разность потенциалов U , равна:

$$E = \frac{U}{l}.$$

Приравнявая уравнения для плотности тока, выразим дрейфовую скорость:

$$enV_{\text{д}} = \frac{1}{\rho} \frac{U}{l},$$

$$V_{\text{д}} = \frac{U}{\rho len}.$$

Подставляя числовые значения, получаем

$$V_{\text{д}} = \frac{10}{1,6 \cdot 10^{-8} \cdot 1 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 10^{28}} = 0,39 \text{ (м/с)}.$$

Задача 3

Электропроводность $\text{Na} = 2,17 \cdot 10^7 \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$, и отношение эффективной массы электрона к массе свободного электрона $\frac{m^*}{m} = 1,2$.

Вычислить: а) время релаксации при $T = 300 \text{ °К}$; б) среднюю длину свободного пробега электронов при 300 °К ; в) дрейфовую скорость $V_{\text{др}}$ в поле $E = 100 \text{ В/м}$.

Решение

Согласно классической теории электропроводности,

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}.$$

Для Na характерна объемно-центрированная кристаллическая решетка с двумя атомами на элементарную ячейку, а значит, число электронов равно двум.

Концентрация электронов

$$n = \frac{2}{a^3} = \frac{2}{(4,3 \cdot 10^{-10})^3} = 2,5 \cdot 10^{28} (\text{м}^{-3}).$$

Из выражения для электропроводности найдем время релаксации

$$\tau = \frac{m^*\sigma}{ne^2}.$$

Подставив известные данные, с учетом $\frac{m^*}{m} = 1,2$, получаем ответ:

$$\tau = \frac{1,2m\sigma}{ne^2} = \frac{1,2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 2,17 \cdot 10^7}{2,5 \cdot 10^{28} \cdot (1,6 \cdot 10^{-19})^2} = 3,7 \cdot 10^{-14} (\text{с}).$$

Время релаксации определяется как

$$\tau = \frac{\lambda}{\langle V \rangle},$$

где λ – средняя длина свободного пробега электронов; $\langle V \rangle$ – средняя скорость теплового движения электронов, определяемая как

$$\langle V \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m^*}}.$$

Среднюю длину свободного пробега электронов при $T = 300$ °К найдем как

$$\lambda = \langle V \rangle \tau = \tau \sqrt{\frac{8kT}{\pi m^*}} = 3,7 \cdot 10^{-14} \cdot \sqrt{\frac{8 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300}{3,14 \cdot 1,2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}}} = 3,6 \cdot 10^{-9} \text{ (м)}.$$

Дрейфовая скорость в поле с напряженностью E с учетом $\frac{m^*}{m} = 1,2$

$$V_{\text{др}} = \frac{eE\tau}{m^*} = \frac{eE\tau}{1,2m}.$$

После подстановки получаем

$$V_{\text{др}} = \frac{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 100 \cdot 3,7 \cdot 10^{-14}}{1,2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}} = 0,54 \text{ (м/с)}.$$

Задача 4

Удельное сопротивление серебряного провода при комнатной температуре равно $1,54 \cdot 10^{-8}$ Ом·м. Вычислить среднюю дрейфовую скорость $V_{\text{др}}$ электронов при напряженности электрического поля вдоль провода 1 В/см, полагая что в 1 м^3 серебра содержится $5,8 \cdot 10^{28}$ электронов проводимости. Определить подвижность и время релаксации электронов.

Решение

Удельное сопротивление – величина, обратная удельной электропроводности σ , с учетом (5.12 – 5.13), определяется как

$$\rho = \frac{m}{ne^2\tau}.$$

Отсюда время релаксации

$$\tau = \frac{m}{ne^2\rho}.$$

Средняя скорость дрейфа электронов в электрическом поле с напряженностью E может быть определена как

$$V_{\text{д}} = \mu E = \frac{e\tau}{m} E.$$

Отсюда подвижность электронов

$$\mu = \frac{V_{\text{д}}}{E} = \frac{\tau e E}{m E} = \frac{\tau e}{m}.$$

Выполнив вычисления, получаем

$$\tau = \frac{m^*}{ne^2\rho} = \frac{9,1 \cdot 10^{-31}}{5,8 \cdot 10^{28} (1,6 \cdot 10^{-19})^2 \cdot 1,54 \cdot 10^{-8}} = 4 \cdot 10^{-14} (\text{с}).$$

$$\mu = \frac{\tau e}{m} = \frac{4 \cdot 10^{-14} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{9,1 \cdot 10^{-31}} = 7 \cdot 10^{-3} (\text{м}^2/\text{В} \cdot \text{с}).$$

$$V_{\text{д}} = \mu E = 7 \cdot 10^{-3} \cdot 1 \cdot 10^{-2} = 0,7 (\text{м/с}).$$

Задача 5

Оцените давление электронного газа в некотором металле при абсолютном нуле, энергия Ферми которого равна 13 эВ, если концентрация электронного газа равна $287 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3}$.

Решение

Давление электронного газа определим, считая электронный газ идеальным:

$$P = \frac{2}{3} n \langle E \rangle.$$

Используя решение задачи 7 в п.4, для средней энергии имеем:

$$\langle E \rangle = \frac{3}{5} E_F(0).$$

Отсюда

$$P = \frac{2}{5} n E_F(0).$$

Подставляя числовые значения, получаем

$$P = \frac{2}{5} 287 \cdot 10^{26} \cdot 13 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} = 0,239 \cdot 10^5 \text{ МПа}.$$

Задача 6

Определите температуру вырождения электронного газа в металле, если концентрация электронов равна $n = 53 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}$.

Решение

Энергия Ферми связана с температурой вырождения, и для температуры получаем

$$T_F = E_F / k.$$

С учетом выражения для энергии Ферми для температуры имеем

$$T_F = \frac{E_F}{k} = \frac{\hbar^2}{k 2m} (3\pi^2 n)^{2/3}.$$

После подстановки данных получаем следующий результат

$$T_F = \frac{(1,05 \cdot 10^{34})^2}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}} [3 \cdot (3,14)^2 \cdot 53 \cdot 10^{27}]^{2/3} = 5,924 \text{ К}.$$

Задача 7

Никелиновый стержень длиной $l = 5 \text{ м}$ подключен к источнику постоянного тока с ЭДС $\mathcal{E} = 12 \text{ В}$. Температура проводника равна $T = 813 \text{ }^\circ\text{К}$. Определить плотность тока j . Удельное сопротивление никелина при $T = 0^\circ\text{К}$ $\rho_0 = 4 \cdot 10^{-7} \text{ Ом}\cdot\text{м}$; температурный коэффициент сопротивления $\alpha = 1 \cdot 10^{-4} \text{ К}^{-1}$.

Решение

Согласно закону Ома в дифференциальной форме для плотности тока имеем

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} .$$

Перепишем закон Ома для удельного сопротивления, и учитывая температурную зависимость ρ для металлов, получаем

$$j = \frac{E}{\rho} = \frac{E}{\rho_0(1 + \alpha T)} .$$

Выразим напряженность электрического поля в стержне через разность потенциалов на его концах

$$E = \frac{\varepsilon}{l} ;$$

$$j = \frac{\varepsilon}{l \rho_0(1 + \alpha T)} .$$

Подставим числовые данные, получаем

$$j = \frac{\varepsilon}{l \rho_0(1 + \alpha T)} = \frac{12}{5 \cdot 4 \cdot 10^{-7} (1 + 0,0813)} \approx 1 \cdot 10^7 \text{ (A/м}^2\text{)} .$$

Контрольные вопросы

1. Что характеризует электропроводность и электросопротивление?
2. Дайте определение удельной проводимости.
3. Что характеризует подвижность носителей заряда?
4. Как изменяется подвижность носителей заряда при повышении температуры?
5. Как зависит электропроводность металлов от температуры?
6. В чем заключается классическая и квантовая теория электропроводности металлов?
7. Что характеризует дрейфовая скорость?
8. Что определяет время релаксации?

Список литературы

1. Стильбанс Л.С. Физика полупроводников/ Л.С. Стильбанс. М.: Сов.радио, 1967.
2. Маделунг О. Теория твердого тела / О. Маделунг. М.: Наука, 1980.
3. Ашкрофт Н. Физика твердого тела / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. – Т.1, Гл. 1–3,8–18. М.: Мир, 1979.
4. Савельев И.В. Курс общей физики / И.В. Савельев. – Т. 3. М.: Наука, 1979.
5. Трофимова Т.И. Курс физики / Т.И. Трофимова. М.: Высш. шк., 1997. – 542 с.
6. Бушманов Б.Н. Физика твердого тела / Б.Н. Бушманов, Ю.А. Хромов. М.: Высш. шк., 1971.
7. Епифанов Г.И. Физика твердого тела / Г.И. Епифанов. М.: Высш. шк. 1977. – 288 с.

5.3. Проводимость полупроводников. Теоретические сведения

Полупроводники – вещества, которые по своим электрическим свойствам занимают промежуточное положение между проводниками и изоляторами.

Различают *собственные и примесные* полупроводники. К собственным полупроводникам относятся химически чистые полупроводниковые материалы (кремний, германий и др.). К примесным относятся полупроводники с искусственно внесенными примесями, причем концентрация примесных атомов чрезвычайно мала (менее 1 %).

Согласно зонной теории, при температуре $T = 0^\circ\text{K}$ у чистых полупроводников валентная зона полностью заполнена электронами, а ширина запрещенной зоны невелика: $\Delta E \leq 1$ эВ. Электрическое поле, приложенное к полупроводнику при самых низких температурах, не в состоянии перебросить электроны из валентной зоны в зону проводимости, поэтому чистые полупроводники ведут себя в этом случае как изоляторы.

При $T > 0^\circ\text{K}$ часть электронов с верхних уровней валентной зоны переходит в результате теплового возбуждения на нижние уровни зоны проводимости. В результате электропроводность полупроводника становится отличной от нуля. Кроме того, вследствие образования вакантных уровней в валентной зоне электроны этой зоны также могут изменить свою скорость под действием внешнего поля. При этом поведение электронов валентной зоны может быть представлено как движение положительно заряженных квазичастиц, получивших название «дырок».

Дырка – вакантное место, способное захватить электрон из соседней ковалентной связи. Дырка может быть занята электроном из валентной зоны, тогда она просто перейдет на другое место. Дырка в валентной зоне равносильна положительному заряду, равному по величине заряду электрона.

Таким образом, по своим электрическим свойствам валентная зона с небольшим числом вакантных состояний эквивалентна пустой зоне, содержащей небольшое число положительно заряженных квазичастиц, называемых дырками.

Распределение электронов по уровням валентной зоны и зоны проводимости описывается функцией Ферми – Дирака (рис. 5.1).

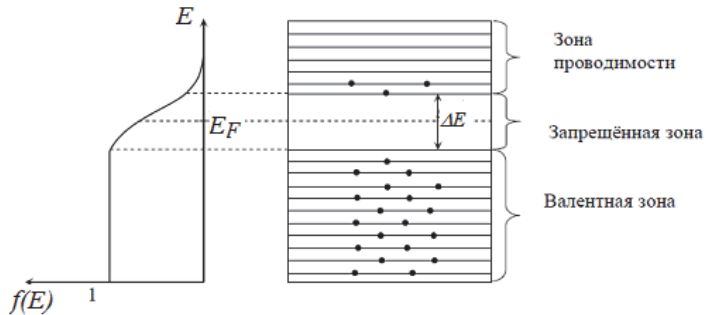


Рис. 5.1. Характер распределение электронов по уровням валентной зоны и зоны проводимости и связь с функцией распределения Ферми – Дирака

У собственных полупроводников отсчитанное от потолка валентной зоны значение уровня Ферми равно:

$$E_F = \frac{1}{2}\Delta E + \frac{3}{4}kT \ln \frac{m_d^*}{m_e^*}, \quad (5.17)$$

где ΔE – ширина запрещенной зоны; m_d^* и m_e^* – эффективные массы дырки и электрона в зоне проводимости.

Поскольку второе слагаемое мало, можно полагать $E_F = \Delta E / 2$. Это означает, что уровень Ферми лежит посередине запрещенной зоны. Следовательно, для электронов, перешедших в зону проводимости, величина $E - E_F$ мало отличается от ширины запрещенной зоны. Вероятность заполнения уровней зоны проводимости электронами можно найти следующим образом:

$$f(E) \approx e^{-\frac{E-E_F}{kT}}. \quad (5.18)$$

Положив $E - E_F = \Delta E / 2$, получим, что

$$f(E) \approx e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}. \quad (5.19)$$

Количество электронов, перешедших в зону проводимости, а следовательно, и количество образовавшихся дырок будет пропорционально

$f(E)$. Эти электроны и дырки являются носителями тока. Поскольку проводимость пропорциональна числу носителей тока, то она также должна быть пропорциональна $f(E)$. Следовательно, электропроводность собственных полупроводников быстрее растет с температурой, изменяясь по закону:

$$\sigma = \sigma_0 e^{\frac{\Delta E}{kT}}. \quad (5.20)$$

где ΔE – ширина запрещенной зоны.

Таким образом, для собственных полупроводников наблюдается характерная температурная зависимость: их проводимость увеличивается с ростом температуры по экспоненциальному закону (напомним, что у металлов она уменьшается). При встрече свободного электрона с дыркой они рекомбинируют. Это приводит к одновременному исчезновению свободного электрона и дырки. *Процессу рекомбинации* соответствует переход электрона из зоны проводимости на один из свободных уровней валентной зоны.

Итак, в собственном полупроводнике идут одновременно два процесса: рождение попарно свободных электронов и дырок и рекомбинация, приводящая к попарному исчезновению электронов и дырок. Вероятность первого процесса быстро растет с температурой. Вероятность рекомбинации пропорциональна как числу свободных электронов, так и числу дырок. В результате при каждой температуре наблюдается определенная равновесная концентрация электронов и дырок.

Когда внешнее электрическое поле отсутствует, электроны проводимости и дырки движутся хаотически. При включении поля на хаотическое движение накладывается упорядоченное движение: электронов против поля и дырок – в направлении поля. Оба движения – и дырок, и электронов – приводят к переносу заряда вдоль кристалла. Следовательно, собственная электропроводность обусловлена как бы носителями двух зарядов – отрицательными электронами и положительными дырками.

Удельная электропроводность в чистом полупроводнике будет складываться из электронной и дырочной проводимостей:

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p = en(\mu_n + \mu_p), \quad (5.21)$$

где e – заряд электрона; n – концентрация свободных электронов, равная в чистом полупроводнике концентрации свободных дырок; μ_n и μ_p – подвижности электронов и дырок соответственно.

Свободные носители заряда – электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне – получили название собственных носителей тока, а обусловленная ими проводимость названа собственной проводимостью полупроводника.

При достаточно высокой температуре собственная проводимость наблюдается во всех без исключения полупроводниках. Однако в полупроводниках, содержащих примесь, электропроводность складывается из собственной проводимости и примесной, причем собственная проводимость при этом много меньше примесной проводимости.

Примесная проводимость возникает в том случае, когда некоторые атомы исходного полупроводника можно заменить в узлах кристаллической решетки атомами примеси, валентность которой отличается от валентности основных атомов на единицу.

Примеси искажают поле кристаллической решетки, что приводит к возникновению на энергетической схеме полупроводника примесных (локальных) уровней, расположенных в запрещенной зоне кристалла вблизи дна зоны проводимости, называемые *донорными уровнями*, или же вблизи потолка валентной зоны, называемые *акцепторными уровнями* (рис. 5.2). Атомы примеси при этом называются соответственно *донорами* и *акцепторами*. Проводимость кристалла объясняется тем, что атомы примеси за счет теплового движения переходят с локальных уровней в зону проводимости. Образованию дырки способствует переход электрона из валентной зоны на акцепторный уровень.

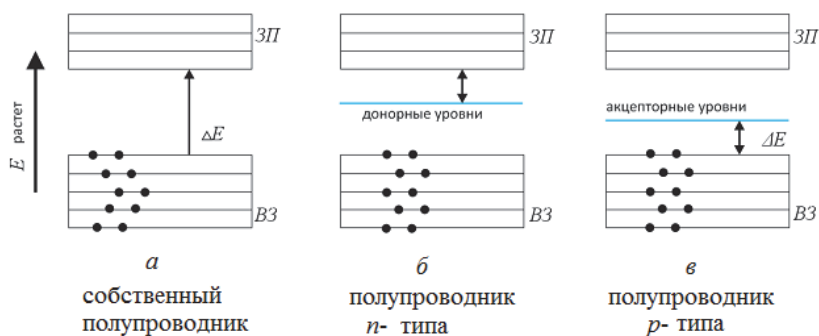


Рис. 5.2. Схематическое изображение зонной структуры собственных (а) и примесных полупроводников (б, в)

В случае если проводимость полупроводника определяется электронами примеси, то такой полупроводник называют полупроводником n -типа, а проводимость – электронной. Если основными носителями будут дырки, то проводимость будет дырочной, а полупроводник – полупроводником p -типа.

В случае двух сортов носителей заряда удельная проводимость полупроводников выражается формулой

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p = en_e\mu_e + ep_p\mu_p, \quad (5.22)$$

где e – заряд электрона; n_e и n_p – концентрации электронов и дырок соответственно; μ_e и μ_p – подвижности электронов и дырок соответственно.

При повышении температуры концентрация примесных носителей быстро достигает насыщения. Это означает, что практически освобождаются все донорные уровни или заполняются электронами все акцепторные уровни. Вместе с тем по мере роста температуры все в большей степени начинает сказываться собственная проводимость полупроводника.

5.4. Примеры решения задач

Задача 1

На рисунке 5.3 изображена полученная экспериментально зависимость проводимости кремния от величины обратной термодинамической температуры. Определить величину запрещенной энергетической зоны для кремния.

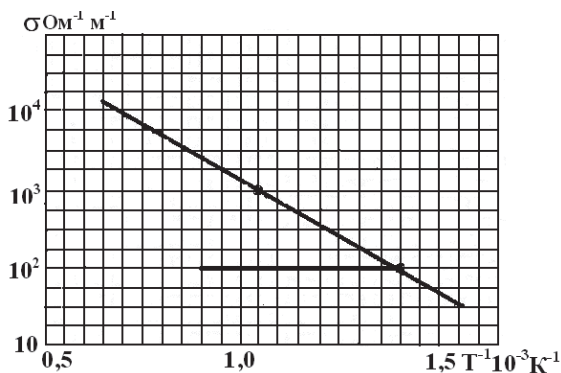


Рис. 5.3. Температурная зависимость проводимости для кремния

Решение

Если построить экспериментальную температурную зависимость проводимости в координатах $\ln \sigma - 1/T$, то угол наклона прямой даст информацию о ширине запрещенной зоны ΔE .

Температурная зависимость удельной электропроводности представлена следующим выражением:

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right).$$

Прологарифмируем левую и правую части уравнения:

$$\ln \sigma = \ln \sigma_0 - \frac{\Delta E}{2k} \left(\frac{1}{T} \right).$$

Найдем ширину запрещенной зоны:

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{\Delta E}{2k} = \frac{\ln(10^3) - \ln(10^2)}{(1,4 - 1,05) \cdot 10^{-3}} = \frac{3 \ln 10 - 2 \ln 10}{0,35 \cdot 10^{-3}} = 6579 \text{ (Дж)}.$$

$$\Delta E = 2k \cdot 6579 = 1,82 \cdot 10^{-19} \text{ (Дж)} = 1,14 \text{ (эВ)}$$

Задача 2

Образец из полупроводника прямоугольной формы размерами $0,2 \cdot 0,2 \cdot 0,05 \text{ см}^3$ имеет 10^{21} свободных зарядов в 1 м^3 при 20°C . К двум противоположным узким граням приложено напряжение 20 В . Вычислить величину тока, полагая подвижность носителей заряда равной $0,03 \text{ м}^2/\text{В с}$.

Решение

Силу тока можно определить как

$$I = jS = jhd.$$

Плотность тока связана с дрейфовой скоростью следующим выражением:

$$j = enV_{\text{д}}.$$

Средняя скорость дрейфа электронов в электрическом поле с напряженностью E

$$V_{\text{д}} = \mu E.$$

Напряженность электрического поля

$$E = U / d.$$

Для плотности тока получим следующее выражение:

$$j = ne\mu \frac{U}{d}.$$

Тогда сила тока может быть определена как

$$I = jhd = ne\mu Uh.$$

После подстановки получаем

$$I = ne\mu Uh = 10^{21} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 0,03 \cdot 20 \cdot 0,05 \cdot 10^{-2} = 0,048 \text{ (A)}.$$

Задача 3

Определить электропроводность Ge, который содержит In в концентрации $2 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ и Sb в концентрации 10^{21} м^{-3} .

Решение

In создает в Германии примесную проводимость p -типа и является акцептором, а сурьма (Sb) является донором, создавая проводимость n -типа.

Удельная проводимость полупроводников в случае двух сортов носителей заряда выражается формулой

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p = e \cdot n_e \mu_e + e \cdot n_p \mu_p,$$

где e – заряд электрона; n_e и n_p – концентрации электронов и дырок соответственно; μ_e и μ_p – подвижности электронов и дырок соответственно имеют следующие значения:

$$\mu_e = 0,38 \text{ (м}^2/\text{В} \cdot \text{с)} \text{ и } \mu_p = 0,18 \text{ (м}^2/\text{В} \cdot \text{с)}.$$

После подстановки получаем

$$\sigma = e(n_e \mu_e + n_p \mu_p) = 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot (0,38 \cdot 10^{21} + 0,18 \cdot 2 \cdot 10^{22}) = 637 \text{ (Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1})$$

Задача 4

Образец Ge нагревают от 0°C до 17°C . Принимаем ширину запрещенной зоны Ge равной $E = 0,72$ эВ. Определить, во сколько раз возрастет его удельная проводимость?

Решение

Температурная зависимость удельной электропроводности описывается следующим выражением:

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\Delta E/2kT}.$$

Для каждой из температур получаем следующую зависимость:

$$\sigma_1 = \sigma_0 e^{-\Delta E/2kT_1};$$

$$\sigma_2 = \sigma_0 e^{-\Delta E/2kT_2}.$$

Найдем отношение $\frac{\sigma_2}{\sigma_1}$:

$$\frac{\sigma_2}{\sigma_1} = \frac{\sigma_0 e^{-\Delta E/2kT_2}}{\sigma_0 e^{-\Delta E/2kT_1}} = e^{\frac{\Delta E}{2} \left(\frac{1}{kT_1} - \frac{1}{kT_2} \right)} = e^{\frac{\Delta E}{2k} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)},$$

$$\frac{\sigma_2}{\sigma_1} = e^{\frac{\Delta E}{2k} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)} = e^{\frac{0,72 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}} \left(\frac{1}{273} - \frac{1}{290} \right)} = e^{0,897} = 2,45.$$

Задача 5

Определить ширину запрещенной зоны собственного полупроводника, если при температурах T_1 и T_2 его сопротивления соответственно равны R_1 и R_2 .

Решение

Температурная зависимость удельного сопротивления для собственного полупроводника может быть описана следующим выражением:

$$R \sim \rho = \rho_0 e^{\Delta E/2kT}.$$

Для двух температур:

$$\rho_1 = \rho_0 e^{\Delta E / 2kT_1};$$

$$\rho_1 = \rho_0 e^{\Delta E / 2kT_2}$$

Найдем отношение $\frac{R_1}{R_2}$:

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{\sigma_0 e^{\Delta E / 2kT_1}}{\sigma_0 e^{\Delta E / 2kT_2}} = e^{\frac{\Delta E}{2k} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)}.$$

Прологарифмируем левую и правую части уравнения и выразим ширину запрещенной зоны:

$$\ln \left(\frac{R_1}{R_2} \right) = \frac{\Delta E}{2k} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right),$$

$$\Delta E = \frac{2k \ln \left(\frac{R_1}{R_2} \right)}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}} = \frac{2kT_1T_2}{T_2 - T_1} \ln \frac{R_1}{R_2}.$$

Ответ:

$$\Delta E = 2k \frac{T_1T_2}{T_2 - T_1} \ln \frac{R_1}{R_2}.$$

Задача 6

Удельное сопротивление собственного Ge при 27 °С составляет 0,47 Ом·м. Полагая, что подвижность электронов и дырок соответственно равны 0,38 и 0,18 м²/В·с, вычислить плотность носителей тока при T= 27°С.

Решение

Для собственного полупроводника $n_e = n_p$ и удельная электропроводность определяется по формуле

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p = en(\mu_e + \mu_p)$$

Плотность носителей тока (концентрация носителей заряда) равна:

$$n = \frac{\sigma}{e(\mu_e + \mu_p)} = \frac{1}{\rho e(\mu_e + \mu_p)}.$$

В данном выражении учтено, что $\sigma = 1/\rho$.

После подстановки получаем

$$n = \frac{1}{\rho e(\mu_e + \mu_p)} = \frac{1}{0,47 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} (0,38 + 0,18)} = 2,37 \cdot 10^{19} \text{ (м}^{-3}\text{)}.$$

Задача 7

Определить положение уровня Ферми в собственном полупроводнике, если

$$n = 2 \left(\frac{m_n kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left[\frac{(E_F - E_c)}{kT} \right] \text{ и } p = 2 \left(\frac{m_p kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left[\frac{(E_V - E_F)}{kT} \right].$$

Решение

Условием существования собственного полупроводника является выполнение равенства $n = p$. Подставляя в него функциональные значения n и p , получим уравнение вида:

$$\exp \left[\frac{(2E_F - E_c + E_V)}{kT} \right] = \left(\frac{m_p}{m_n} \right)^{3/2}.$$

Логарифмируя обе части равенства и решая его относительно уровня Ферми, получим

$$E_F = \frac{1}{2} (E_c + E_V) + \frac{3}{4} kT \ln \left(\frac{m_p}{m_n} \right).$$

Задача 8

Вычислить положение уровня Ферми при $T = 300^\circ\text{К}$ в кристалле Германия, содержащем $2 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ атомов мышьяка и 10^{22} м^{-3} атомов Галлия.

Решение

Выполнение неравенства $N_d > N_a$ означает, что полупроводник проявляет проводимость n -типа. При этом избыточная концентрация доноров $N_d' = N_d - N_a$. При $T = 300^\circ\text{К}$ все доноры ионизированы, поэтому можно принять $n \approx N_d'$.

Из выражения

$$n = N_E \exp\left(\frac{E_c - E_F}{kT}\right)$$

находим:

$$(E_c - E_F) = k \ln \frac{N_c}{N_d} = 8,625 \cdot 10^{-5} \cdot 300 \cdot \ln \frac{1,02 \cdot 10^{25}}{10^{22}} = 0,179 \text{ эВ}.$$

Задача 9

Вычислить собственную концентрацию носителей заряда в Кремнии при $T = 300^\circ\text{К}$, если ширина его запрещенной зоны $E_g = 1,12 \text{ эВ}$, а эффективные массы состояний равны $m_c = 1,05 m_0$, $m_v = 0,56 m_0$.

Решение

В собственном полупроводнике вследствие выполнения равенства $n = p$ достаточно определить концентрацию собственных электронов, характер изменения которых описывается выражением

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(\frac{E_g}{2kT}\right),$$

где эффективную плотность квантовых состояний, которые способны занять электроны (N_c) и дырки (N_v), можно определить, используя выражения:

$$\begin{aligned} N_c &= 2 \left(\frac{2\pi k T m_c}{h^2} \right)^{3/2} = \frac{2 \left(2 \cdot 3,14 \cdot 1,05 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} T \right)^{3/2}}{\left(6,62 \cdot 10^{-34} \right)^3} = \\ &= 2,69 \cdot 10^{25} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2}. \end{aligned}$$

$$N_V = \frac{2 \left(2 \cdot 3,14 \cdot 0,56 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} T \right)^{3/2}}{\left(6,62 \cdot 10^{-34} \right)^3} = 1,05 \cdot 10^{25} \left(\frac{T}{100} \right)^{3/2}.$$

Используя для решения задачи эти значения, получим

$$n_i = 10^{25} \sqrt{2,69 \cdot 1,05} \exp \left(\frac{1,12}{2 \cdot 8,625 \cdot 10^{-5} \cdot 300} \right) \approx 7 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-3}.$$

Задача 10

Известно, что поверхность кремния (Si) в качестве легирующей примеси содержит 10^{-4} атомных процентов мышьяка (As). Затем он легируется фосфором (P) до $3 \cdot 10^{16}$ ат/см³ и после этого равномерно легируется бором (B) до 10^{18} ат/см³. Полученная структура проходит термический отжиг, который полностью активировывает примеси.

- Какой тип проводимости будет иметь образец кремния?
- Чему будет равна концентрация основных носителей заряда?

Решение

Мышьяк является элементом V группы таблицы Менделеева, поэтому он является донорной примесью. Структура кремния содержит $5 \cdot 10^{22}$ см⁻³ атомов матрицы и 10^{-4} атомных процента атомов примеси мышьяка. Это означает, что концентрация атомов As в Si равна $5 \cdot 10^{22} \cdot 10^{-6} = 5 \cdot 10^{16}$ см⁻³. Дополнительное легирование Si фосфором ($3 \cdot 10^{16}$ см⁻³) увеличивает содержание доноров в Si до $8 \cdot 10^{16}$ см⁻³, а легирование Si бором превращает Si *n*-типа в полупроводник *p*-типа проводимости, так как концентрация акцепторов теперь будет превосходить концентрацию доноров. Результирующая концентрация акцепторов будет меньше, чем атомов бора.

Таким образом:

- Кремний имеет *p*-тип проводимости;
- концентрация основных носителей заряда

$$p = N_a(B) - [N_d(As) + N_d(P)] = 10^{18} - (5 \cdot 10^{16} + 3 \cdot 10^{16}) = 9,2 \cdot 10^{17}.$$

Контрольные вопросы

1. Дайте определение полупроводника? Основные типы полупроводников?
2. Назовите основные носители тока в металлах и полупроводниках.
3. От чего зависит проводимость полупроводника?
4. Что такое собственная и примесная проводимость?
5. Какие типы проводимости имеют место в полупроводниках и как определить тип проводимости?
6. Как зависит от температуры проводимость полупроводника?
7. В чем заключается процесс рекомбинации?
8. Как образуются носители заряда в примесных полупроводниках акцепторного и донорного типов?
9. Как рассчитать удельную проводимость собственного и примесного полупроводников?
10. Как изменяется с ростом температуры концентрация собственных и примесных носителей заряда?

Список литературы

1. Бонч-Бруевич В.А. Физика полупроводников / В.А. Бонч-Бруевич. – М.: Наука, 1977. – 672 с.
2. Сильбанс Л.С. Физика полупроводников / Л.С. Сильбанс. М.: Сов. радио, 1967.
3. Маделунг О. Теория твердого тела / О. Маделунг. М.: Наука, 1980.
4. Ашкрофт Н. Физика твердого тела / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. – Т. 1, Гл.1–3,8–18. М.: Мир, 1979.
5. Савельев И.В. Курс общей физики / И.В. Савельев. – Т. 3. М.: Наука, 1979.
6. Трофимова Т.И. Курс физики / Т.И. Трофимова. М.: Высш. шк., 1997. – 542 с.
7. Бушманов Б.Н. Физика твердого тела / Б.Н. Бушманов, Ю.А. Хромов. М.: Высш. шк., 1971.
8. Епифанов Г.И. Физика твердого тела / Г.И. Епифанов. М.: Высш. шк. 1977 – 288 с.

Навчальне видання

БАГМУТ Олександр Григорович
ДРОЗДОВА Ганна Анатоліївна

ОСНОВИ ФІЗИКИ ТВЕРДОГО ТІЛА

Навчально-методичний посібник

Роботу до видання рекомендувала *проф. Любченко О.А.*

Редактор *О.С. Самініна*

План 2016 р., поз. 9.

Підп. до друку 17.02.18. Формат 60×84 1/16. Папір офсетний.
Riso-друк. Гарнітура Times. Ум. друк. арк. 5,8.
Наклад 50 прим. Зам. № 34. Ціна договірна

Видавець і виготовлювач
Видавничий центр НТУ «ХП»,
вул. Кирпичова, 2, м. Харків-2, 61002

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 5478 від 21.08.2017р.